

# Doktori értekezés

Buchta Krisztián

2008

*Alacsony dimenziós kvantumrendszerek vizsgálata  
a sűrűségmátrixos renormálási csoport-algoritmus alkalmazásával*  
Buchta Krisztián  
2007

Eötvös Loránd Tudományegyetem  
Természettudományi Kar  
Fizika Doktori Iskola  
Anyagtudomány és szilárdtestfizika program  
A Doktori Iskola vezetője: Horváth Zsolt, az MTA r. tagja, egyetemi tanár  
Programvezető: Lendvai János, egyetemi tanár  
Témavezető: Sólyom Jenő, az MTA r. tagja, kutatóprofesszor  
Társ témavezető: Legeza Örs, tudományos főmunkatárs  
Az értekezés a Magyar Tudományos Akadémia  
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézetének  
Elméleti Szilárdtestfizika Osztályán készült.

ALACSONY DIMENZIÓS KVANTUMRENDSZEREK  
VIZSGÁLATA A SŰRŰSÉGMÁTRIXOS  
RENORMÁLÁSICSOPORT-ALGORITMUS  
ALKALMAZÁSÁVAL

Doktori értekezés

*A dolgozatot írta:* Buchta Krisztián

*Témavezető:* Sólyom Jenő

*Társtémavezető:* Legeza Örs



A Magyar Tudományos Akadémia  
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézete,  
Elméleti Szilárdtestfizika Osztály





# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>1</b>
<b>2. Sűrűségmátrixos renormálásicsoport-algoritmus</b>	<b>5</b>
2.1. Blokk- és Wilson-féle renormálásicsoport-algoritmusok . . . . .	6
2.2. A DMRG algoritmus . . . . .	8
2.2.1. Végtelenrács-algoritmus . . . . .	11
2.2.2. Végesrács-algoritmus . . . . .	12
2.3. Dinamikus blokkállapot-kiválasztás . . . . .	14
2.4. Operátorok várható értékeinek kiszámítása . . . . .	17
<b>3. Kvantumos fázisátalakulások</b>	<b>21</b>
3.1. A Neumann-entrópiák . . . . .	23
3.2. Fázisátalakulások és Neumann-entrópiák . . . . .	24
3.3. Neumann-entrópiák a DMRG algoritmusban . . . . .	28
3.4. Dimer rendparaméter . . . . .	30
<b>4. Spinnematikus fázis a bilineáris-bikvadratikus <math>S = 1</math> spinmodellben</b>	<b>31</b>
4.1. A bilineáris-bikvadratikus modell ismert fázisai . . . . .	32
4.2. Ellenőrzés a dimerizált fázisban . . . . .	35
4.2.1. A numerikus módszer paraméterezése, pontossága . . . . .	35
4.2.2. Energiagap . . . . .	37
4.2.3. Dimer rendparaméter . . . . .	38
4.3. A spinnematikus fázis létének kérdése . . . . .	39
4.4. Fázisdiagram . . . . .	41
<b>5. Mott-átalakulás és dimerizáció az 1D-s <math>SU(n)</math> Hubbard-modellben</b>	<b>43</b>
5.1. $SU(n)$ Hubbard modell és az ismert eredmények . . . . .	44
5.2. A numerikus módszer paraméterezése, pontossága, indikátormennyiségek . . . . .	46
5.2.1. Numerikus pontosság . . . . .	47
5.2.2. Fázishatárok . . . . .	48
5.3. Az $SU(2)$ modell mint referencia rendszer . . . . .	48
5.4. Félig töltött $SU(n)$ modellek . . . . .	51
5.4.1. Páros $n$ . . . . .	52

5.4.2.	Páratlan $n$ . . . . .	54
5.5.	$1/n$ betöltöttségű $SU(n)$ modellek . . . . .	57
5.5.1.	$n = 3$ . . . . .	57
5.5.2.	$n > 3$ . . . . .	61
5.6.	Dimerizáció és a kritikus Coulomb-taszítás . . . . .	62
<b>6.</b>	<b>Semleges-ionos átalakulás vizsgálata</b> . . . . .	<b>63</b>
6.1.	A semleges-ionos átalakulás modelljei és az ismert eredmények . . . . .	64
6.2.	Egyesített Hamilton-operátor . . . . .	68
6.3.	Indikátormennyiségek és pontosság . . . . .	74
6.3.1.	Energiagapok . . . . .	74
6.3.2.	Ionicitás, dimer rendparaméter és rácspon-entrópiák . . . . .	75
6.3.3.	Numerikus pontosság . . . . .	76
6.4.	Egyesített fázisdiagram . . . . .	76
6.4.1.	$V = 0$ . . . . .	77
6.4.2.	Nagy negatív $\varepsilon/t$ . . . . .	80
6.4.3.	Kis $\varepsilon/t$ . . . . .	82
6.4.4.	Fázisátalakulások $\varepsilon/t$ és $V/t$ függvényében . . . . .	85
6.5.	A semleges-ionos átalakulás egyesített modellje és fázisdiagramja . . . . .	86
<b>7.</b>	<b>Az elektron-fonon csatolás szerepe a semleges-ionos átalakulásban</b> . . . . .	<b>89</b>
7.1.	Ismert eredmények, az elektron-fonon csatolás . . . . .	90
7.2.	Az alkalmazott numerikus eljárás . . . . .	93
7.2.1.	A dimerizált fázis határai . . . . .	93
7.2.2.	A fázisátalakulás rendje . . . . .	95
7.2.3.	A numerikus pontosság . . . . .	97
7.2.4.	Alapállapot energiája . . . . .	98
7.2.5.	Ionicitás . . . . .	99
7.3.	Fázishatárok az elektron-fonon csatolás jelenlétében . . . . .	100
7.3.1.	$\alpha = 0$ . . . . .	100
7.3.2.	$\alpha = 1/2$ . . . . .	103
7.4.	Fázisdiagram . . . . .	104
<b>8.</b>	<b>Összefoglalás</b> . . . . .	<b>107</b>
	<b>Irodalomjegyzék</b> . . . . .	<b>111</b>

# Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom Sólyom Jenőnek és Legeza Örsnek a témavezetésért, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karának a színvonalas képzésért, valamint a Magyar Tudományos Akadémia Szilárdtestfizikai és Optikai kutatóintézetének a doktori munka feltételeinek biztosításáért. Köszönet illeti Penc Karlot és Virosztek Atillát is a dolgozat átnézéséért és javaslataikért. Továbbá köszönöm Szirmai Edinának a sok hasznos konzultációt és segítséget. A legnagyobb köszönet azonban szüleimet illeti, szeretném megköszönni belém vetett bizalmukat és mindenkori támogatásukat.



# 1. fejezet

## Bevezetés

"But," Bohr protested, "nobody will believe me unless I can explain every atom and every molecule." Rutherford was quick to reply, "Bohr, you explain hydrogen and you explain helium and everybody will believe the rest."

John Archibald Wheeler (1986)

Számos, napjainkban igen népszerű kutatási terület kapcsolódik az alacsony dimenziós (1D-s és csatolt 1D-s), vagy arra leképezhető rendszerek tulajdonságainak megismeréséhez. Ez nem véletlen, hiszen sokszor tapasztalhatjuk látszólag egyszerű, 3D-s anyagok esetében, hogy molekuláik egymáshoz képesti elhelyezkedése, azok alakja, vagy éppen a közöttük kialakuló kötések természete okán kvázi-egydimenziós, vagy kvázi-kétdimenziós rendszereként kezelhetők. Ez az oka annak, hogy napjainkban az alacsony dimenziós rendszerek vizsgálata a szilárdtestfizika intenzíven kutatott területei közé tartozik.

A háromdimenziós elektronrendszerek jó közelítéssel normál Fermi-rendszerként kezelhetők, alkalmazható rájuk a perturbációszámítás. Vezető rendben megállva, a Hartree–Fock-közelítés tulajdonképpen egy átlagtér-közelítés (a Fock-tag miatt már a kicserélődést is tartalmazza) és mint ilyen, úgy kezeli az elektront, mintha az egy effektív egyrészecskes potenciálban mozogna, azaz kis mértékben módosítja a rácsot felépítő ionok vonzó potenciálját. Ilyenkor az ionokon lévő elektronok hullámfüggvényének átfedéséből adódóan sávok alakulnak ki (egyszerű sávkép), és az elektronok ezekben a sávokban első közelítés-

ben szabadon mozognak, ezt a képet az elektronok közötti kölcsönhatás figyelembevétele csak pontosítja.

Ez az a pont, ahol alacsony dimenziós rendszerek esetén a háromdimenziós módszerek alkalmazhatósága kétségesé válik, ugyanis egydimenziós rácsban az elektron-elektron kölcsönhatás már nem kezelhető korrekcióként, a Fermi-él elmosódik, a perturbációs számítás már vezető rendben divergál. Spinnel rendelkező fermionok esetén tovább bonyolódik a helyzet. Az egyszerű fermiongerjesztések felhasadnak töltést (töltéssűrűség-hullám típusú) és spint hordozó (spinsűrűség-hullám típusú) kollektív gerjesztésekké, melyek sebessége általában különböző. Az egydimenziós rendszerek e speciális viselkedésének leírására több módszer is született.

Bizonyos kölcsönhatások esetén, mikor a szórási folyamatok közül csak az előreszórás releváns, alkalmazhatjuk a Luttinger-modellt, ekkor az egydimenzióban csupán két pontból álló Fermi-felület közelében a diszperziós relációt hatványsorának első tagjával közelítjük, azaz linearizáljuk. Néhány speciális esetben alkalmazhatjuk a Bethe-ansatzot is, amivel egy egydimenziós, sokrészecskés Hamilton-operátor diagonalizálását vezethetjük vissza egy nem lineáris egyenletrendszer megoldásának problémájára. Bevett módszer az is, hogy az egydimenziós fermiongáz sűrűségfluktuációkhoz kapcsolódó kollektív gerjesztéseinek leírására bozon reprezentációt alkalmazunk, mikor a sűrűségfluktuációkhoz mint propagáló módusokhoz új bozonikus részecskéket rendelünk és a fluktuációkat leíró operátorokkal fejezzük ki a modell Hamilton-operátorát. Természetesen a 2. fejezetben bemutatásra kerülő numerikus módszerekről sem feledkezhetünk el, melyek széles körben alkalmazott hatékony eszközt jelentenek az alacsony dimenziós kvantumrendszerekben megjelenő fázisok vizsgálatához.

Amikor egydimenzióban fázisokról és kvantumos fázisátalakulásról<sup>1</sup> beszélünk valójában a fázist jellemző rendeződéssel szemben mutatott instabilitásról van szó, ugyanis a Coleman-tétel értelmében a felerősödő kvantumfluktuációk meggátolják a hosszú távú rend létrejöttét.

Ne higgyük azonban, hogy alacsony dimenziós rendszerek és fázisaik vizsgálata pusztán a kvantummechanika mélyebb megértését célzó szellemi kihívást jelent! Utaltunk már rá, hogy több kvázi-egydimenziós vagy kétdimenziós rendszerként kezelhető anyagcsaládot ismerünk. A legjobb példát a dolgozatban is, az ionos Hubbard- és a donor-akceptor

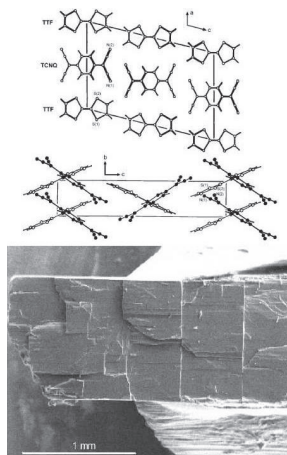
<sup>1</sup>A makroszkopikus rendben megmutatkozó klasszikus fázisátalakulás akkor következik be, mikor a rendszer a kritikus hőmérséklet alá hűl. Ezzel szemben a kvantumos fázisátalakulások abszolút nulla fokon, a kvantumfluktuációk következtében mennek végbe, valamely csatolási állandó, vagy külső paraméter megváltozásának következtében. Mindkét kritikus pontban divergál a rendszer korrelációs hossza, de kvantumos rendszerek esetében további, nem klasszikus korrelációk is megjelennek (összefonódottság).

modellek keretei között vizsgált, hosszú, lineáris láncokat alkotó molekulákat tartalmazó szerves vezetők jelentik.

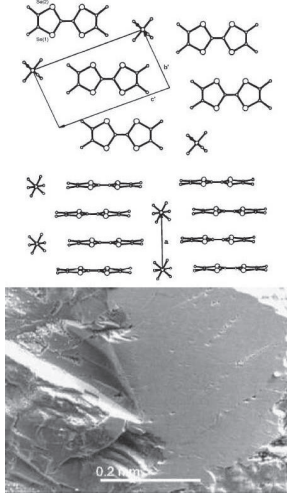
Ezekben a vegyületekben nagy lapos, általában aromás molekulák egymásra rakódva láncokat alkotnak, és az elektronok e láncok mentén mozognak. Különlegességük abban áll, hogy a láncok irányában mért vezetőképességük nagyságrendileg megegyezik a fémek vezetőképességével, a hőmérséklet csökkenésével azonban gyorsan növekszik. A szerves vezetők tulajdonságai azonban nem molekuláris eredetűek, hanem a szomszédos molekulák közötti kölcsönhatás következményei. Ez a kölcsönhatás lehet van der Waals típusú, ionos, vagy akár gyengén kovalens is. Az ilyen anyagokat kis sávszélesség és megközelítőleg 0.5-2 eV molekulánkénti Coulomb-energia jellemzi, így erősen kölcsönható korrelált rendszerekről beszélünk. E tulajdonságuk következménye a szerves töltéshordozók sokat jellemző rendkívül sokféle szimmetriasértő alapállapot, mint például a spinsűrűség- és töltéssűrűség-hullám, a spin-Peierls és a szupravezető állapotok.

Szerkezetükből adódóan a szén nanocsövek is kvázi-egydimenziós rendszerként kezelhetők, hiszen hosszuk és átmérőjük között megközelítőleg 6 nagyságrend a különbség ( $l \sim 10^{-3}$  m,  $\varnothing \sim 10^{-9}$  m, mechanikailag erős, aránylag jó hő- és elektromos vezetők, szerkezetük stabil, különlegességük, hogy alacsony hőmérsékleten szupravezetők).

Az utóbbi időben egyre érdekesebbé vált az olyan mágneses rendszerek vizsgálata is, melyekben a mágneses momentumot hordozó atomok között dominánsan csak egy vagy két irányban lényeges a kicserélődési kölcsönhatás, a többi irányban viszont a kicserélődési



**1.1. ábra.** Egydimenziós szerves vezetők, a TTF-TCNQ szerkezete ( $T < 54$  K esetén töltéssűrűség-hullám az alapállapota) a  $b$  kristálytengely mentén és az  $(a, b)$  sík oldalnézete (forrás: T. J. Kistenmacher, T. E. Phillips, and D. O. Cowan, Acta Crystallogr., Sect. B **30**, 763 (1974)), valamint a kristályról pásztázó elektron mikroszkóppal készített felvétel (forrás: M. Sing, U. Schwingenschlögl, and R. Claessen cond-mat/0208422v3 (2003)).



**1.2. ábra.** Egydimenziós szerves vezető, a  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$  szerkezete ( $p > 6.5 \cdot 10^7$  Pa esetén szupravezetővé, légköri nyomáson,  $T < 12$  K esetén spinsűrűséghullám az alapállapota) a  $a$  kristálytengely mentén és az  $(a, b)$  sík oldalnézete (forrás: N. Thorup, G. Rindorf, H. Soling, and K. Bechgaard, *Acta Crystallogr., Sect. B* **37**, 1236 (1981)), valamint a kristályról pásztázó elektron mikroszkóppal készített felvétellel (forrás: M. Sing, U. Schwingenschlögl, and R. Claessen *cond-mat/0208422v3* (2003)).

ink ismertetésére, a vizsgálatainknál alkalmazott sűrűségmátrixos renormálási csoport-algoritmust mutatjuk be (2. fejezet), majd rámutatunk a fázisátalakulások és az összefonódottság mértéke között fennálló kapcsolatra (3. fejezet). A 4. fejezetben a bilineáris-bikvadratikussal  $S = 1$  spinmodellről, a 5. fejezetben pedig az  $\text{SU}(n)$  Hubbard-modellről lesz szó, végül az 6. és 7. fejezetek a semleges-ionos átalakulással foglalkoznak. A 8. fejezet tartalmazza a dolgozat eredményeinek összefoglalását és a tézispontokat. Munkám során a sűrűségmátrixos renormálási csoport-algoritmust alkalmazó numerikus számításokhoz a Legeza Örs által fejlesztett programcsomagot használtuk.

kölcsönhatásnak megfelelő energia elhanyagolhatóan kicsi a termikus energiához képest. Az ilyen rendszerek mágneses szempontból egydimenziós, vagy csatolt egydimenziós rendszernek tekinthetők még akkor is, ha egyéb szempontból valódi háromdimenziós kristályként viselkednek. A dolgozatban vizsgált bilineáris-bikvadratikussal spinmodell is egy ilyen egydimenziós spinláncot ír le.

Ezek az anyagoknak nem csupán a szerkezetük és a bennük megvalósuló egzotikus fázisok miatt érdekesek, azért is fontosak, mert lehetőséget jelentenek az alacsony dimenziós spin- és elektronrendszerek elméletileg jósolt viselkedésének kísérleti ellenőrzésére.

Doktori munkám során én is egydimenziós rendszerekkel foglalkoztam. Három, egymástól jól elkülönülő problémakör képezi a dolgozat témáját, melyeket az alkalmazott numerikus módszer szorosan összeköt. Mielőtt azonban rátérnénk eredményeink



## 2. fejezet

# Sűrűségmátrixos renormálásicsoport-algoritmus

Napjainkban egyre tökéletesebb technikai eljárások, egyre tökéletesebb kísérleti berendezések állnak a kutatók rendelkezésére. Így időről-időre új, eddig még nem észlelt, vagy értelmezett fizikai jelenségek látják el munkával az elméleti fizika területén dolgozó szakembereket. E valós fizikai rendszerekben tapasztalt jelenségek matematikai tárgyalása, értelmezése csak közelítő modelleket alkalmazva, sok esetben csak numerikus módszerekkel lehetséges. Tekintsünk egy kristályos szilárd testet: nagyságrendileg  $10^{23}$  egymással kölcsönható elektront és atommagot látunk. E rendszer viselkedését – elméletileg – tökéletesen leírhatjuk a rendszer Schrödinger-egyenletének megoldásával. Azonban gyakorlatilag, a rendszer komplexitása miatt, a Schrödinger-egyenlet megoldása, a test *a priori* leírása lehetetlen, a matematikai tárgyalás csak a vizsgálódásunk tárgyát képező jelenség szempontjából nem releváns kölcsönhatások elhanyagolásával, numerikusan lehetséges. E felismerés vezetett számos, kvantumrendszerek elméleti vizsgálatára során alkalmazott numerikus módszer létrejöttéhez.

A legegyszerűbb ilyen eljárás az egzakt diagonalizáció. A rács Hamilton-operátor felírását követően annak direkt, numerikus diagonalizációjával nagy pontossággal (14 tizedesjegy) határozható meg az alapállapot és a gerjesztett állapotok<sup>1</sup> Ezzel a módszerrel nagyságrendileg 10 rácspont kezelhető, ami komoly korlátot jelent a módszer alkalmazhatóságát tekintve, ugyanis a kis számú rácspont a nagy pontosságú számolás ellenére is gyakorlatilag lehetetlenné teszi a rendszer tulajdonságainak elfogadható pontosságú ter-

---

<sup>1</sup> Iteratív sajátérték kereső eljárásokkal többnyire a legalacsonyabban fekvő néhány gerjesztett állapotot tudjuk hatékonyan számolni.

modinamikai határesetbe történő extrapolációját.

A kvantumos Monte-Carlo-módszer sokkal nagyobb rendszerek vizsgálatát teszi lehetővé. Ez a sztochasztikus eljárás a soktest-rendszerek vizsgálatakor, a sokrészesecsés hullámfüggvényekkel felírt várható értékek kiszámításakor előkerülő sokdimenziós integrálok elvégzését teszi lehetővé a célállapot hullámfüggvényének direkt közelítésével. Ezt azonban csak egy bizonyos statisztikus bizonytalanság mellett tehetjük meg, amit csak a hullámfüggvény szimulációk számának növelésével csökkenthetünk.<sup>2</sup> Éppen ez szab határt a módszer alkalmazhatóságának.

Az 1970-es években kidolgozott blokk és Wilson féle renormálásicsoport-algoritmusok jelentik az alapját a napjainkban legszélesebb körben alkalmazott numerikus eljárásnak, a sűrűségmátrixos renormálásicsoport-algoritmusnak. A módszerek lényegesen eltérnek, de alap gondolatuk közös, éppen ezért érdemes az említett két algoritmus működését egy kissé részletesebben körüljárni. Most is, akárcsak a soktest-probléma numerikus módszereinek áttekintésénél témavezetőm, Legeza Örs gondolatmenetét [Le, 1998] fogom követni.

## 2.1. Blokk- és Wilson-féle renormálásicsoport-algoritmusok

A blokkrenormálásicsoport-algoritmus alkalmazásával végtelen hosszúságú kvantumos láncokat leíró Hamilton-operátorok energiaspektrumának meghatározására nyílik lehetőségünk. Az algoritmus működésének lényegét a következő pontokban foglalhatjuk össze:

1. Tekintsünk két egyenként  $q$  szabadsági fokú rácspontot és diagonalizáljuk a kétrácspontos rendszer  $q^2$  dimenziós Hamilton-operátorát.
2. Így  $q^2$  darab sajátállapothoz jutunk. A renormálási lépés során az egy rácspontos rendszer bázisállapotainak szimmetriájának megfelelően, a legkisebb energiájú  $q$  darab állapotot tartjuk meg, míg a többi sajátállapotot elhanyagoljuk. E  $q$  számú állapot reprezentálja a következőkben a két rácspontot tartalmazó blokkot.
3. Ezekután a vizsgált modell rácsooperátorait kifejezzük az új redukált bázison (erről a sűrűségmátrixos renormálásicsoport-algoritmus kapcsán részletesen szó lesz a 2.2. szakaszban). A renormált rácsooperátorok szabadsági foka így megegyezik a kiindulási

---

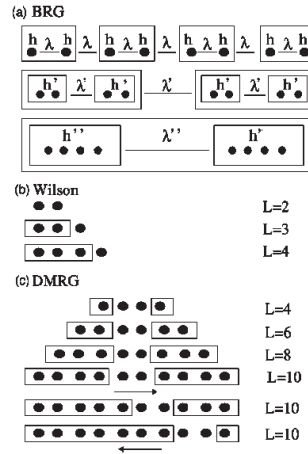
<sup>2</sup>Bozon és fermion rendszerekre is alkalmazhatjuk a kvantumos Monte Carlo módszert (az energia várhatóértékek pontossága polinomiálisan, illetve exponenciálisan növekszik a szimulációk számával), de vegyes rendszerekre alkalmazható algoritmus még nem ismeretes.

rácsoperátorokéval. Követeljük meg, hogy a Hamilton-operátor felépítése maradjon változatlan a renormálási lépésben, így csupán a csatolási állandók erőssége skálázódik át, azok száma és a rendszer dimenziója változatlan marad.

4. Az ily módon kapott új  $q^2$  dimenziós problémát a már megismert módon kezeljük.
5. A végtelen hosszú rács viselkedését a csatolási állandók skálázódásával, azaz a renormálási módszer fix pontjának tanulmányozásával kapjuk.

K. G. Wilson fejlesztette tovább az algoritmust a Kondo-probléma megoldása során. Az új módszert nagy érdeklődés fogadta. Úgy tűnt, hogy sok alacsony dimenziós kvantumrácsmódel<sup>3</sup> kezelhető ily módon. Az már kezdetben is világos volt, hogy nem remélhető a Kondo-probléma megoldásakor talált rendkívüli pontosság más rendszerekkel dolgozva, de a kvalitatív értelmezés terén sokat vártak a módszertől, mely alapötlete ismételten az, hogy diagonalizáljuk két  $q$  szabadsági fokú kölcsönható kvantumos rács pont Hamilton-operátorát, majd reprezentáljuk a rendszert a  $q'$  legkisebb energiájú sajátállapottal ( $q'$ -t az energiaspektrum alakulását figyelembe véve szisztematikusan növeljük az első néhány iterációs lépésben egy maximális értékig, majd rögzítjük). Az iteráció során egy véges  $N$  hosszúságú láncot építünk fel kvantumos rács pontokból, miközben a kvantumállapotok szisztematikus elhanyagolásával egy rögzített értéken tartjuk a Hilbert-tér dimenzióját.

A legfontosabb különbség a blokkrenormálási csoport-algortimushoz képest az, hogy Wilson



**2.1. ábra.** A blokk (a) és Wilson féle (b) renormálási csoport-algoritmusok, valamint a 2.2. szakaszban részletesen bemutatásra kerülő DMRG (c) algoritmusok alkalmazása során felépülő blokk struktúrák sematikus ábrázolása. Forrás: Ö. Legeza, J. Röder, and B. A. Hess Phys. Rev. B **67**, 125114 (2003)

<sup>3</sup>Például a Hubbard- és Heisenberg-modellek.

nem tartotta meg a Hamilton-operátor kiindulási felépítését<sup>4</sup> és az energia  $N$  függéséből következtetett a rendszer fix pontjára.

A Wilson-féle renormálási csoport-algoritmust alkalmazva azonban, akárcsak a blokk-renormálási csoport-algoritmus esetében, a hiba szisztematikusan növekszik az iteráció során. A numerikus pontosság csökkenésének oka, a renormált blokk mindkét végén nyitott határfeltétel mellett, az állapotok vágása. Arra vonatkozóan ugyanis, hogy a renormálási lépésben mely állapotokat tekintjük a vizsgált rendszer szempontjából fontosnak és tartjuk meg, illetve mely állapotokat hanyagoljuk el, nem létezik semmilyen feltétel. Így a legalacsonyabb energiájú állapotok megtartása sem feltétlenül vezet eredményre. Ezt a problémát oldotta meg S. R. White a sűrűségmátrixos renormálási csoport-algoritmus kidolgozásával, mellyel több száz rácspont hosszúságú kvantumláncok vizsgálata is lehetséges. Ezt a módszert, mivel doktori munkám alapját képezi, most részletesebben ismertetem. Sokszor fogunk hivatkozni a sűrűségmátrixos renormálási csoport-algoritmusra, ezért a továbbiakban e numerikus módszer angol, *Density-Matrix Renormalization Group procedure*, elnevezéséből kiindulva a szakirodalomban elterjedt DMRG rövidítést fogjuk alkalmazni.

## 2.2. A DMRG algoritmus

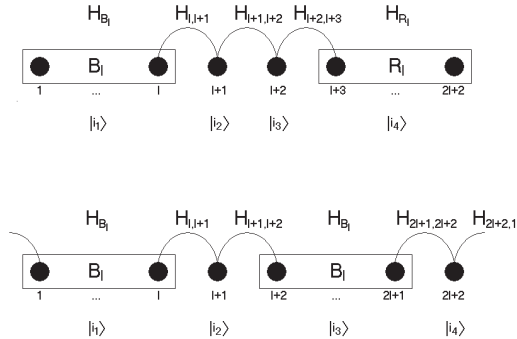
A DMRG algoritmus a már röviden bemutatott blokkrenormálási csoport-algortimushoz hasonlóan egy valós térbeli renormálási eljárás, azonban a két módszer lényegesen különbözik egymástól: a DMRG algoritmust alkalmazva valódi, véges rácsot építünk fel, a termodinamikai határesethez pedig nem az eljárás fix pontjának vizsgálata, hanem a különböző hosszúságú láncok esetén számolt eredmények extrapolációja vezet. További fontos különbség a rendszer szempontjából lényeges állapotok kiválasztásának módja. Lássuk, pontosan miről is van szó!

A DMRG algoritmusban egy  $N = 2l + 2$  hosszúságú lánc felépítése a cél, amit egy speciálisan választott, a 2.2. ábrán bemutatott, szuperblokk-konfiguráció alkalmazásával érünk el.<sup>5</sup>  $B_l$  az  $l$  rácspontot ( $1 \rightarrow l$ ) tartalmazó, ún. rendszerblokkot jelöli, míg  $R_l$  a  $B_l$  blokk

<sup>4</sup>A renormalizáció szisztematikusan alkalmazásával új tagok is megjelennek a Hamilton-operátorban, de ezek legtöbbször irrelevánssá válik az  $N$  lánc hossz növekedésével, így végül valóban a rendszer fix pontjába jutunk.

<sup>5</sup>A dolgozatban vizsgált összes modell szimmetrikus és legfeljebb elsőszomszéd kölcsönhatásokat tartalmaz, ezt pedig a DMRG algoritmusban is kihasználhatjuk. A továbbiakban, a DMRG algoritmus bemutatásánál is feltételezni fogjuk e speciális tulajdonságokat. A 2.2. ábrán bemutatott szuperblokk konfiguráció is csak elsőszomszéd kölcsönhatások esetén használható. Természetesen a módszer a hosszú távú kölcsönhatások és általános szimmetriával rendelkező modellek kezelését is lehetővé teszi.

tükröztötte ( $l + 3 \rightarrow 2l + 2$ ). A  $\bullet$  szimbólum a rácspontokat, míg a jelölt rácspontokhoz tartozó rácsoперátorokkal felírható kölcsönhatásokat  $\mathcal{H}$  reprezentálja. Nyitott határfeltétel esetén a 2.2. ábra első részábráján bemutatott konfiguráció érvényes, míg periodikus határfeltétel esetén a másik konfigurációt szokás alkalmazni, ugyanis ellenkező esetben a két rendszerblokk közötti csatolásban minden operátornak a renormált bázison vett közelítő alakja jelenne meg, ami nyilván pontatlanabb annál, mintha az egyik rácspontot egzakt operátorok reprezentálnák.



**2.2. ábra.** A DMRG algoritmusban alkalmazott superblokk konfiguráció (felül: nyitott határfeltételnél, alul: periodikus határfeltétel esetén).  $B_l$  az  $l$  rácspontot tartalmazó rendszerblokk,  $R_l$  pedig a tükröztötte. A rácspontokat a  $\bullet$  szimbólum jelöli.

Az algoritmus kiindulási állapota a  $B_l \bullet \bullet R_l$  konfigurációnak megfelelően egy  $N = 4$  rácspont hosszúságú lánc, azaz  $l = 1$  és a  $B_l$  és  $R_l$  blokkokat egzakt egyrácspontos állapotok írják le. A renormálási lépésben a teljes  $B_l \bullet \bullet R_l$  superblokk rendszer sajátfüggvényeinek felhasználásával a  $B_l \bullet$  rendszert renormáljuk egy effektív  $B_{l+1}$  rendszer állapotaiba, így a  $B_l \bullet$  rendszer nem izolált, hanem egy nagyobb rendszer részét képezi, melyben a  $\bullet R_l$  rendszer a környezetet szimulálja. Az eljárás lényege az, hogy először diagonalizáljuk<sup>6</sup> a superblokkon ható Hamilton-operátort és meghatározzuk a  $|\psi\rangle$  célállapotot, ami rendszerint az alapállapot, vagy valamely gerjesztett állapot. Majd az így kiszámított  $|\psi\rangle$

<sup>6</sup>A mátrix alakban reprezentált Hamilton-operátor diagonalizációjához [Num] bármely eljárását választanánk, de a diagonalizálandó mátrix nagy mérete miatt az iteratív diagonalizációs eljárások alkalmazása az egyetlen gyakorlatban is működő lehetőség. Ezek közös alap gondolata az eredeti operátor egy megfelelően választott, alacsony dimenziós al térre történő vetítése, majd egzakt diagonalizálása. A DMRG algoritmus alkalmazásakor leggyakrabban a [Ja, 2002]-ben és [Da, 1975]-ben bemutatott Lanczos és Davidson diagonalizáló rutinokat alkalmazzák. A Davidson-algoritmust dominánsan diagonális Hamilton-operátorok, míg a Lanczos algoritmust ritka mátrixok esetében célszerű alkalmazni.

állapotot felírjuk a  $B_l \bullet$  részrendszer  $|i_1, i_2\rangle$ -vel jelölt állapotainak, valamint a környezetet reprezentáló  $\bullet R_l$  részrendszer  $|i_3, i_4\rangle$ -vel jelölt állapotainak lineárkombinációjaként:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4} \Psi(i_1, i_2, i_3, i_4) |i_1, i_2\rangle |i_3, i_4\rangle. \quad (2.1)$$

Célunk az, amennyiben  $M$  blokkállapotot kívánunk megtartani, hogy meghatározzunk egy  $|i_1^*\rangle = \sum_{i_1, i_2} \Psi(i_1, i_2) |i_1, i_2\rangle$ ,  $M$  állapotból álló rendszert, mellyel a  $B_l \bullet$  konfiguráció  $|i_1, i_2\rangle$  állapotait helyettesítve, a lehető legjobban megközelítjük a szuperblokk rendszer (2.1)-ben felírt, eredeti  $|\psi\rangle$  célállapotát. Másképpen fogalmazva: keressük a

$$\left\| |\psi\rangle - \sum_{i_1^*, i_3, i_4} \Psi(i_1^*, i_3, i_4) |i_1^*\rangle |i_3, i_4\rangle \right\| \quad (2.2)$$

szuperblokk állapotterén értelmezett skalár függvény minimumát. S. R. White [Wh, 1992]-ben megmutatta, hogy a renormálás során a fenti hiba akkor minimalizálható, ha az  $|i_1^*\rangle$  állapotrendszert az alábbi,

$$|i_1^*\rangle = \sum_{i_1, i_2} O_{\alpha; i_1, i_2} |i_1, i_2\rangle \quad (\alpha = 1, \dots, M) \quad (2.3)$$

alakba írjuk, ahol az állapotok vágásáért felelős  $O$  mátrixot a  $B_l \bullet$  konfiguráció redukált sűrűségmátrixának sajátvektoraiból képezzük,<sup>7</sup>  $O$  sorait a sűrűségmátrix  $M$  számú legnagyobb  $\omega_\alpha$  sajátértékéhez tartozó  $u_{i_1, i_2}^\alpha$  sajátfüggvényei alkotják, azaz  $O_{\alpha; i_1, i_2} = u_{i_1, i_2}^\alpha$ . A rácsoперátorokat az  $A \rightarrow OAO^\dagger$  összefüggés szerint renormáljuk ( $A$  rácsoперátor,  $O$  pedig az imént bevezetett  $M \times \dim(|i_1, i_2\rangle)$  méretű mátrix). A  $B_l \bullet$  részrendszer  $\rho_{i_1, i_2; i_1', i_2'}$  redukált sűrűségmátrixát pedig az alábbi,

$$\rho_{i_1, i_2; i_1', i_2'} = \sum_{i_3, i_4} \Psi(i_1, i_2, i_3, i_4) \Psi(i_1', i_2', i_3, i_4), \quad (2.4)$$

összefüggés szerint számíthatjuk ki a (2.1) által előírt  $\Psi(i_1, i_2, i_3, i_4)$  lineárkombinációs együtthatók mátrixából.

Az iménti renormálást végrehajtva a  $B_l \bullet \bullet R_l$  konfigurációból eljutottunk a  $B_{l+1} R_{l+1}$  rendszerhez, melyet két újabb rácsponttal bővítve visszkapjuk az immáron  $N = 2(l+1)+2$

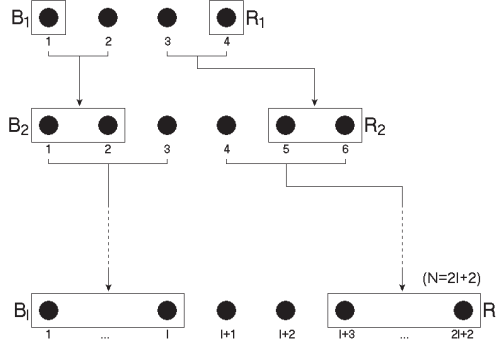
<sup>7</sup>A teljes rendszerben a sűrűségmátrix legnagyobb sajátértékéhez tartozó sajátfüggvénye található meg a legnagyobb súllyal. A sajátállapotok valószínűségi eloszlása azonban függ a vizsgált modelltől és az alkalmazott határfeltételtől is.

rácpontot tartalmazó  $B_{l+1} \bullet \bullet R_{l+1}$  kiindulási konfigurációt és a már megismert módon folytathatjuk a lánc felépítését.

### 2.2.1. Végtelenrács-algoritmus

A fent bemutatott eljárás a DMRG algoritmus legegyszerűbb változata, a végtelenrács-algoritmus. A  $B_l \bullet \bullet R_l$  konfigurációból kiindulva, az iterációs lépésként két rácponttal bővülő,  $N = 2l + 2$  hosszúságú lánc felépülését a 2.3. ábrán követhetjük nyomon. Az előző szakaszban már megismert eljárást megvalósító algoritmus működését pedig az alábbi pontokban foglalhatjuk össze:

1. Vegyük föl a  $B_l \bullet \bullet R_l$  konfigurációnak megfelelően az  $N = 4$  rácpontos kiindulási szuperblokkot, írjuk fel az operátoraink mátrixrepresentációját!
2. Írjuk fel a szuperblokk  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{B_l} + \mathcal{H}_{l,l+1} + \mathcal{H}_{l+1,l+2} + \mathcal{H}_{l+2,l+3} + \mathcal{H}_{R_l}$  Hamilton-operátorának mátrixrepresentációját!
3. Diagonalizáljuk a  $\mathcal{H}$  szuperblokk Hamilton-operátort és határozzuk meg a  $|\psi\rangle$  célállapotot (ld.: 2.4. szakasz).  $|\psi\rangle$ -t felhasználva kiszámíthatjuk a számunkra érdekes operátorok várható értékét!
4. A (2.1) és (2.4) összefüggések alapján írjuk fel a  $B_l \bullet$  részrendszer  $\rho_{i_1, i_2; i'_1, i'_2}$  redukált sűrűségmátrixát!
5. Diagonalizáljuk a  $\rho_{i_1, i_2; i'_1, i'_2}$  sűrűségmátrixot és határozzuk meg az  $M$  számú legnagyobb  $\omega_\alpha$  sajátértékhez tartozó  $u_{i_1, i_2}^\alpha$  ( $\alpha = 1, \dots, M$ ) sajátvektorokat!
6. A blokkoperátorokból építsük fel a  $B_l \bullet$  részrendszer operátorainak mátrixrepresentációját, majd az  $O_{\alpha; i_1, i_2} = u_{i_1, i_2}^\alpha$  bázistranszformációval térjünk át az  $u^\alpha$  ( $\alpha = 1, \dots, M$ ) bázisra és renormáljuk a rácsoperátorokat is (pl.  $\mathcal{H}_{B_{l+1}} = O \mathcal{H}_{B_l \bullet} O^\dagger$ )! Ezzel definiáltuk az új,  $B_{l+1}$  blokkot.
7. Végezzük el a  $B_l \rightarrow B_{l+1}$  helyettesítést!
8. Végezzük el az  $R_l \rightarrow R_{l+1}$  helyettesítést ( $R_{l+1}$  a  $B_{l+1}$  blokk tükrözöttje)!
9. Írjuk fel a  $B_{l+1} \bullet \bullet R_{l+1}$  szuperblokk-konfiguráció  $\mathcal{H}$  Hamilton-operátorának mátrix-representációját és *folytassuk* a végtelenrács-algoritmust a 3. ponttól mindaddig, míg  $l < \frac{N}{2} - 1$ !



**2.3. ábra.** Az  $N = 2l + 2$  hosszúságú lánc felépítése a végtelenrác-algoritmus alkalmazásával.  $B_l$  az  $l$  rácspontot tartalmazó rendszerblokk,  $R_l$  pedig a tükrözöttje. A rácspontokat a  $\bullet$  szimbólum jelöli.

Tehát egy lépés során először felépítjük a szuperblokk Hamilton-operátort, majd meghatározzuk a célállapotot. Kiszámítjuk a redukált sűrűségmátrixot, renormáljuk a rácsoперátorokat. A renormálás után merev lemezen eltároljuk a  $B_{l+1}$  blokkhoz tartozó rácsoперátorokat. A vizsgálni kívánt fizikai mennyiségek várható értékei a célállapot meghatározását követően számíthatók ki (ld.: 2.4. szakasz).

### 2.2.2. Végesrác-algoritmus

A végtelenrác-algoritmus ismételt alkalmazásával felépíthetjük a vizsgálni kívánt  $N$  rácspontot tartalmazó láncot, miközben a fizikai mennyiségek méretfüggésére is jó közelítő összefüggés kapható. Az alapállapot energiáját többnyire már a végtelenrác-algoritmussal is aránylag pontosan meghatározhatjuk, azonban ez a pontosság tovább javítható. Éppen ezért a végtelenrác-algoritmust a DMRG algoritmus  $l = 1$  első ciklusaként szokás alkalmazni, amit a blokkoperátorok pontosabb meghatározását célzó, a környezet járulékát pontosító végesrác-algoritmus követ.

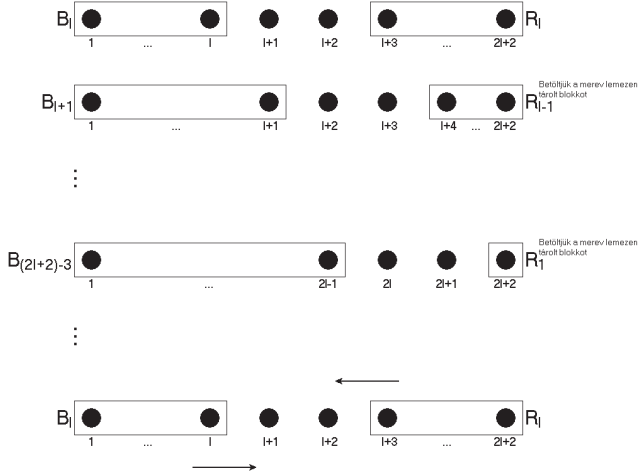
A vizsgálni kívánt  $N$  lánc hossz elérését követően, a végesrác-algoritmus végrehajtásához a  $B_l \bullet \bullet R_{N-l-2}$  összeállításnak megfelelően megváltoztatjuk a szuperblokk-konfigurációt.<sup>8</sup> Az  $l = \frac{N}{2} + 1, \dots, N - 3$  méretű  $B_l$  blokkokat kiszámítjuk és merevlemezre letároljuk, míg az  $R_{N-l-2}$  blokkokra a végtelenrác-algoritmussal meghatározott és letárolt blokkoperátorokat használjuk. Ezután a fenti folyamat inverzeként újra kiszámítjuk a  $B_l$ ,  $l = 1, \dots, N - 3$

<sup>8</sup>Az algoritmus végrehajtása során már nem változik meg a lánc  $N$  hosszúsága.



blokkoperátorokat. A DMRG algoritmus  $l = 2$  második ciklusa akkor fejeződik be, amikor a  $B_{N/2} \bullet \bullet R_{N/2-2}$  konfigurációból kiinduló iteráció a  $B_{N-3} \bullet \bullet R_l$  szuperblokk konfiguráción át visszajut a kiindulási  $B_{N/2} \bullet \bullet R_{N/2-2}$  konfigurációhoz.

A végesrács-algortmussal a  $B_l$  blokk környezete válik pontosabbá, csökken a környezet okozta hibajárulék, a sweepelés aszimmetrizálja a rendszert, ami a fluktuációk kiátlagolásához vezet és így végső soron pontosabb blokkoperátorokkal számolhatunk. A vizsgálni kívánt fizikai mennyiségek a  $B_{N/2-2}$  méretű blokkokkal előállított szuperblokk-hullámfüggvénnyel határozhatók meg. Az algoritmus pontos működését az alábbi pontokban foglalhatjuk össze:



**2.4. ábra.** A végesrács-algoritmus működésének szemléltetése, sweepelés.  $B_l$  az  $l$  rácspontot tartalmazó rendszerblokk,  $R_l$  pedig a tükrözöttje. A rácspontokat a  $\bullet$  szimbólum jelöli.

1. A végtelenrács-algortmussal  $N/2 - 1$  lépésben felépítjük a vizsgálni kívánt  $N$  rácspontot tartalmazó láncot. Minden iterációs lépésben tároljuk a merevlemezén a  $B_l$  blokk Hamilton-operátorát és a blokkvég-operátorok mátrixait ( $l = 1, \dots, N/2$ ).
2. Legyen  $l = N/2$  és tekintsük a  $B_l \bullet \bullet R_{N-l-2}$  szuperblokk-konfigurációt ( $R_{N-l-2}$  a  $B_{N-l-2}$  blokk tükrözöttje)!

3. Hajtsuk végre a végtelenrács-algoritmust a 2. lépéstől a 7.-ig, ezzel meghatározzuk az  $l + 1$  indexű  $B_{l+1}$  blokkot!
4. Tároljuk  $B_{l+1}$ -et, amennyiben már volt  $l + 1$ -el indexelt blokk a merevlemezen, akkor írjuk felül!  
 $l < N - 3$  : *következő lépés*: 5.  
 $l = N - 3$  : *következő lépés*: 6.
5. Növeljük az  $l$  blokk indexet ( $l = l + 1$ ) és ismét a  $B_l \bullet \bullet R_{N-l-2}$  konfigurációból kiindulva legyen a  
*következő lépés*: 3!
6. Legyen  $l = 1$ , állítsuk elő a  $B_1 \bullet \bullet R_{N-3}$  konfigurációt, ahol  $R_{N-3}$  az előző iterációs lépésben meghatározott  $B_{N-3}$  tükrözöttje!
7. Hajtsuk végre a végtelenrács-algoritmust a 2. lépéstől a 7.-ig, ezzel meghatározzuk az  $l + 1$  indexű  $B_{l+1}$  blokkot, amit tárolni kell a merevlemezen, lecserélve a korábban rögzített,  $l + 1$ -el indexelt blokkot!  
 $l < N - 3$  : *következő lépés*: 8.  
 $l = N - 3$  : *következő lépés*: 6.
8. Legyen  $l = l + 1$  és ismét a  $B_l \bullet \bullet R_{N-l-2}$  konfigurációból ( $l \leq N/2 - 1$  esetén  $R_{N-l-2}$  az előző iterációs ciklusban meghatározott, míg  $l > N/2 - 1$  esetén az aktuális iterációs ciklus egy korábbi lépésében meghatározott és tárolt  $B_{N-l-2}$  blokk tükrözöttje) kiindulva legyen a  
*következő lépés*: 7.

A sweepelés menetét a 2.4. ábra szemlélteti. Természetesen a végerács-algoritmus iterációs ciklusa tetszőlegesen sokszor végrehajtható, de a következő fejezetekben látni fogjuk, hogy az eljárás két vagy három sweep ( $I = 2, 3$ ) elvégzését követően konvergál.

### 2.3. Dinamikus blokkállapot-kiválasztás

Foglalkoznunk kell még a DMRG algoritmus kapcsán az eljárás pontosságával. Az algoritmus alkalmazásakor fellépő hiba két részből tevődik össze:

1. A vágási hibából, amit a renormalizációs lépésben követünk el, mikor a sűrűségmátrixban kis súllyal megjelenő blokkállapotokat elhagyjuk.
2. Valamint a környezeti hibából, ami abból fakad, hogy a vizsgált láncot blokkokra bontva kezeljük. Ez egyúttal a hosszú távú kölcsönhatások egy nem természetes levágását is jelenti.

Legeza és Fáth [Pe, 1998]-ben megmutatta, hogy a környezeti hiba kiátlagolható és vizsgáló soron a valódi hiba és a vágási procedura során megtartott blokkállapotok súlyának  $(\omega_\alpha)$  egytől való eltéréseként definiált

$$\delta_{\text{TRE}} = 1 - \sum_{\alpha=1}^M \omega_\alpha \quad (2.5)$$

vágási hiba között log-log skálán megközelítőleg lineáris a kapcsolat. Az azonban ront a helyzeten, hogy a vágási hiba erősen függ a redukált sűrűségmátrix sajátértékspektrumának alakjától, azaz attól, hogy kritikus, vagy sem a vizsgált modell<sup>9</sup> és a megtartott blokkállapotok  $M$  számától. Végül pedig a sűrűségmátrix sajátértékspektruma akkor is változik, miközben a célállapot közelít az egzakt megoldáshoz. Mindebből világosan látszik, hogy az  $M$  számú legvalószínűbb blokkállapot megtartásával nem tudjuk az algoritmus hibáját megfelelőképpen kontrollálni, sőt az algoritmus komplexitása miatt azok a kísérletek is kudarca vannak itélve, melyek az eljárás hibáját pusztán a blokkállapotok  $M$  számával próbálják összefüggésbe hozni.

Legeza, Röder és Hess a pontosság kontrollálását úgy oldotta meg, hogy  $M$  értékét dinamikusan változtatták az algoritmus végrehajtása során, ezzel véve figyelembe a redukált sűrűségmátrix sajátértékspektrumának változásait [Le, 2003]. Az eljárás lényege az, hogy a (2.5) vágási hiba egyetlen iterációs lépésben se haladjon meg egy előre rögzített hibakorlátot,

$$\delta_{\text{TRE}} < \delta_{\text{TRE}}^{\max} \quad (2.6)$$

azaz  $M$  értékét ismételtelen mindaddig kell növelnünk, míg az elhanyagolt állapotok felösszegzett súlya el nem éri a vágási hiba előre meghatározott  $\delta_{\text{TRE}}^{\max}$  maximális küszöbértékét. A vágási hiba és a kiszámított  $E$  energia-sajátérték hibája között nincsen közvetlen kapcsolat, a blokkállapotok dinamikusan kiválasztásával csak a relatív hibát kontrollálhatjuk,

---

<sup>9</sup>Nemkritikus modellek esetében, mikor a koherencia hossz és az energiagap is véges, a sűrűségmátrix sajátértékspektruma exponenciálisan csökken, míg kritikus modellek esetében, mikor végtelen a koherencia hossz a csökkenés polinomiális.

az abszolút hibát az  $E(\delta_{\text{TRE}}^{\text{max}})$  függvénykapcsolat  $\delta_{\text{TRE}}^{\text{max}} \rightarrow 0$  extrapolációjával kaphatjuk.

A módszer továbbfejlesztéseként Legeza és Sólyom azt javasolta [Le, 2004], hogy ne az iterációs lépésenkénti vágási hiba  $\delta_{\text{TRE}}^{\text{max}}$  maximális értékére tegyünk megködtést, hanem követeljük meg a Kholevo-feltétel [Kh, 1973] teljesülését egy  $\chi_{\text{max}}$  maximális kvantuminformáció-vesztesség mellett. Ezzel a módszerrel stabilizálni tudjuk az algoritmus relatív hibáját. A dolgozatban szereplő problémák vizsgálatát is a lépésenkénti kvantuminformáció-vesztességet minimalizáló dinamikus blokkállapot-kiválasztást alkalmazva végeztük el. Az eljárás lényegét az alábbi pontokban foglalhatjuk össze:

1. Amennyiben az algoritmus végrehajtása során a megtartott blokkállapotok száma kielégíti az  $M \geq q^{l+1}$  relációt, úgy az új blokkállapotok egzaktul reprezentálnak egy  $N = l + 1$  rácspontot tartalmazó láncot.
2. Máskülönben,  $M < q^{l+1}$  esetén a blokkállapotok számának levágása következtében minden renormálási lépésben

$$\chi = \sum_{\alpha=1}^M -\omega_{\alpha} \ln \omega_{\alpha} - \sum_{\alpha=1}^{M'} -\omega'_{\alpha} \ln \omega'_{\alpha} \quad (2.7)$$

kvantuminformáció-vesztességgel számolunk tovább ( $\omega_{\alpha}$  a sűrűségmátrix  $M$  darab sajátértéke,  $-\sum_{\alpha} \omega_{\alpha} \ln \omega_{\alpha}$  a Neumann-féle kvantuminformációs entrópia, a vágási procedúra során megtartott  $M'$  legnagyobb sajátértéket pedig a normálást követően  $\omega'_{\alpha}$ -val jelöltük,  $\alpha = 1, \dots, M'$ ).

3. Amennyiben a megtartott blokkállapotok  $M$  számát nagyobbak választjuk, csökkenthetjük az egyes renormálási lépések  $\chi$  kvantuminformáció-vesztességét.<sup>10</sup> Ez lehetőséget teremt az algoritmus hibájának kontrollálására: megkövetelhetjük, hogy egy iterációs lépés során  $\chi$  legyen kisebb egy előre meghatározott  $\chi_{\text{max}}$  maximális kvantuminformáció-vesztésénél és a

$$\chi \leq \chi_{\text{max}} \quad (2.8)$$

relációnak eleget is tudunk tenni a megtartott blokkállapotok  $M$  számának megfelelő megválasztásával, így implicit módon korlátozhatjuk az algoritmus abszolút hibáját.

---

<sup>10</sup>  $N$  hosszúságú láncnál  $M \geq q^{N/2-1}$  esetén nem követünk el hibát.

Persze a hiba nem csökkenthető korlátlanul, hiszen a blokkállapotokat el kell tudnunk tárolni és képesnek kell lennünk műveleteket végrehajtani velük, így végső soron a számítási kapacitásunk szab határt az algoritmus pontosságának.

Technikai oldalról nézve a dinamikus blokkállapot-kiválasztás legnagyobb eredménye, az eljárás hibájának kontrollálásán felül az, hogy a  $B_{l=\frac{N}{2}-1} \bullet \bullet R_{l=\frac{N}{2}-1}$  szimmetrikus konfigurációnál megtartott  $M$  számú blokkállapothoz képest a többi ( $B_{l \geq N/2} \bullet \bullet R_{l \leq N/2}$ ) konfiguráció esetében jóval kevesebb  $M' \ll M$  blokkállapottal is teljesíthetjük a (2.8) feltételt, ez pedig jelentősen megnöveli a renormálási lépés hatékonyságát és megkönnyíti a következő iterációs lépés szuperblokk Hamilton-operátorának felírását.

Az egy renormálási lépésben bekövetkező  $\chi$  kvantuminformáció-veszteség nagysága és az algoritmus renormálási lépései során felhalmozott abszolút hiba között nem határozható meg analitikus összefüggés, csak az mutatható meg, hogy a DMRG algoritmus adott  $\chi$  melletti konvergenciáját követően fennáll egy entrópia-összegszabály [Le, 2004], mely a teljes információveszteség és a rendszer entrópiája között teremt kapcsolatot. Ezért, az összegszabály kihasználása mellett, érdemes a vizsgált modell valamely speciális paraméter-beállítása mellett rendelkezésre álló egzakt megoldást összehasonlítani a DMRG algoritmus kimenetével, így pontosabb képet kaphatunk a kiszámított fizikai mennyiségek hibáját illetően. Doktori munkám során minden egyes probléma vizsgálatakor végeztünk ilyen referenciaszámításokat.

## 2.4. Operátorok várható értékeinek kiszámítása

Az utolsó kérdés amivel foglalkoznunk kell még az az, hogy a DMRG algoritmust alkalmazva hogyan számíthatjuk ki az egyes fizikai mennyiségeket. Az energia-sajátértékek, a többi vizsgálni kívánt fizikai mennyiséggel együtt a szuperblokk-rendszer célállapotának meghatározása után (a végtelenrács-algoritmus 3. pontjában – 2.2.1. szakasz) számíthatók ki. Az egypont korrelációs függvények – pl. a mágneszettség  $z$  irányú komponensének várható értéke a  $B_l$  blokk  $j$ -edik rácspontjában – az alábbi alakban írható fel:

$$\langle \psi | S_j^z | \psi \rangle = \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4, i'_1} \Psi^*(i_1, i_2, i_3, i_4) (S_j^z)_{i_1, i'_1} \Psi(i'_1, i_2, i_3, i_4). \quad (2.9)$$

A dolgozatban nem csak egypont korrelációs függvényekkel dolgozunk. Többször elő fog kerülni az alapállapot dimerizációjának kérdése, így szükségünk lesz egy dimer rendet leíró rendparaméterre. Ezt az alábbi módon, a szomszédos rácspontok közötti kölcsönhatási

energia különbségének várható értékeként szokás definiálni:

$$D = \lim_{N \rightarrow \infty} D(N) = \lim_{N \rightarrow \infty} |D_{N/2}|, \quad (2.10)$$

ahol

$$D_i = \langle \mathcal{H}_{i-1,i} \rangle - \langle \mathcal{H}_{i,i+1} \rangle. \quad (2.11)$$

Természetesen a DMRG algoritmussal csak véges  $N$  számú rácpontot tartalmazó láncokat tanulmányozhatunk és az így kapott eredményekből kell extrapolálnunk az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetre. Ezt az M. E. Fischer és M. N. Barber által bevezetett végesméret-skálázás [Fi, 1971] segítségével tehetjük meg. A statisztikai fizikai rendszerekre megfogalmazott elmélet ugyanis alkalmazható a kvantumos fázisátalakulásokra is, amennyiben a korrelációs hosszak ( $\xi$ ) a kvantumrendszer energiagapját ( $\Delta$ ) feleltetjük meg a  $\Delta = 1/\xi$  kifejezés alapján, ahogyan azt témavezetőm Legeza Örs [Le, 1998]-ben részletezi.

Kritikus, gap nélküli modelleknél a  $\Delta(N)$  energiagap  $1/N$ -nel tart nullához, míg nem kritikus modellek esetében a skálázódás határfeltétel-függő:

1. Nyitott határfeltétel esetén a korrekciók polinomiálisan, vezető rendben  $1/N^2$ -tel csengenek le:

$$\Delta(N) = \Delta + \frac{b}{N^2} + \mathcal{O}(N^{-4}), \quad (2.12)$$

amit a dolgozatban vizsgált  $S = 1$  spinmodellek esetében kvalitatív módon a következőképpen értelmezhetünk [Sr, 1993]: a magnon diszperzió  $\epsilon(k) = \sqrt{\Delta^2 + v^2 k^2}$  kvadratikusan a minimumhely körül és nyitott határfeltétel esetén  $k = \pm\pi/N$  a legkisebb lehetséges momentumérték, így a legkisebb lehetséges gerjesztési energiára, a gapre, éppen az imént felírt összefüggés adódik,

$$\Delta(N) = \sqrt{\Delta^2 + v^2(\pi/N)^2} \approx \Delta + \frac{\pi^2 v^2}{2\Delta N^2} + \mathcal{O}(N^{-4}).$$

Így numerikus számolásoknál a pontosság növelése érdekében a

$$\Delta(N) = \Delta + \frac{a}{N} + \frac{b}{N^2}. \quad (2.13)$$

összefüggéssel szokás extrapolálni a véges, nyitott láncokon számolt adatpontokat.  $\Delta$  jelöli az energiagap  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben felvett értékét,  $a$  és  $b$  pedig konstans paraméterek.

2. A DMRG számolásoknál ritkán alkalmazott periodikus határfeltétel<sup>11</sup> mellett az energiagap vezető rendben exponenciálisan skálázódik a lánc hossz függvényében, azaz

$$\Delta(N) = \Delta + c \frac{1}{N^{1/2}} \exp(-N/\xi). \quad (2.14)$$

A lokális mennyiségek, mint a dimer rendparaméter, vagy a rácspont-entrópiák (ld. 3. fejezet) ennél gyorsabban skálázódnak az  $N$  lánc hossz függvényében. Nem kritikus modell esetében a rendszer viselkedését egy véges  $\xi$  korrelációs hossz határozza meg, ennek megfelelően a lánc véges méretéből adódó hatások exponenciálisan csengenek le és a lokális mennyiségek vezető rendben a következőképpen skálázódnak:

$$A(N) = A + dN^{-\beta} \exp\left(-\frac{N}{2\xi}\right), \quad (2.15)$$

ahol  $A(N)$  egy tetszőleges lokális mennyiséget jelöl,  $N$  a lánc rácspontjainak száma,  $\xi$  a koherenciahossz,  $d$  és  $\beta$  konstans paraméterek,  $A$  pedig a keresett termodinamikai határérték.

A lokális mennyiségek skálázódását leíró fenti, (2.15) összefüggés csak abban különbözik az energiagap periodikus határfeltétel mellett mutatott skálázódásától (2.14), hogy az exponensben a lánc hossz helyett a láncvégektől (a határoktól) mért távolság jelenik meg és a  $\beta$  exponens is szabad paraméter, azaz lokális mennyiségekkel dolgozva nyitott határfeltétel mellett is exponenciálisan gyors skálázódást kapunk. Ez azt jelenti, hogy, amennyiben társítható a kérdéses problémához valamilyen lokális mennyiség, akkor a kedvezőbb skálázási tulajdonsága okán érdemes azt vizsgálni.

Ezzel a végére értünk a DMRG algoritmus tömör ismertetésének. Mielőtt azonban rátérnénk a dolgozat témájául szolgáló modellrendszerek vizsgálatára, hátra van még a kvantumós fázisátalakulások észlelésének és lokalizációjának bemutatása, miközben ki fogunk térni egy viszonylag új, a DMRG algoritmushoz is köthető, a dinamikus blokkállapot-kiválasztáshoz hasonlóan, szintén az információs entrópiára épülő módszerre is.

<sup>11</sup> A DMRG algoritmussal [Wh, 1992] (2.2.1. és 2.2.2. szakaszok), dinamikus blokkállapot-kiválasztást [Le, 2003, Le, 2004] alkalmazva (2.3. szakasz) nyitott határfeltétel mellett jóval kevesebb blokkállapot megtartásával kielégíthető a (2.8) reláció [Le, 2006]. Ennek az az oka, hogy periodikus határfeltétel mellett a rendszerblokk két interfészen keresztül kapcsolódik a környezethez, így a kvantumállapotok összefonódottságának mértéke is jelentősen meghaladja az egy interfészes nyitott lánc esetén tapasztaltat. A rendszer kvantuminformáció-tartalma és a megtartott blokkállapotok száma között pedig nem egyszerű arányosság a kapcsolat. Mindez azt jelenti, hogy nyitott határfeltétellel gyorsabban tudunk számolni, mint periodikussal, így hosszabb láncokkal dolgozhatunk, ami végsősoron pontosabb végesméret-extrapolációhoz vezet.





## 3. fejezet

# Kvantumos fázisátalakulások

A kvantumos fázisátalakulások a sokrészecske-rendszer alapállapot tulajdonságaiban, a részecskék közötti kölcsönhatás módosulása okán, valamely csatolási állandó függvényében bekövetkező változások, melyek  $T=0$  hőmérsékleten mennek végbe, amikor a részecskék de Broglie hullámhossza meghaladja a termikus fluktuációk korrelációs hosszát (a fázisátalakulás a kvantumfluktuációk következtében megy végbe). A kvantumos fázisátalakuláskor az energiaspektrumban megjelenő nem analitikus viselkedést az energianívók keresztesződésével (aszimptotikus keresztesződésével), vagy az alapállapot degenerálttá válásával magyarázhatjuk.

Ha a  $\lambda$  dimenziótlan csatolási állandó függvényében vizsgáljuk a rendszert leíró  $\mathcal{H}(\lambda)$  Hamilton-operátor sajátértékspektrumát, általában azt tapasztaljuk, hogy az alapállapot energiája  $e$  csatolási állandó sima, analitikus függvénye. Azonban az energiaspektrum  $\lambda$  függése miatt megtörténhet, hogy az egyik,  $\lambda < \lambda_c$  esetén gerjesztett állapot energiasajátértéke  $\lambda > \lambda_c$  esetén minimálissá válik, azaz az energiaszintek egy kritikus  $\lambda_c$  értéknél keresztesződnek elrontva ezzel az alapállapot energiája  $\lambda$  függvényében mutatott analitikus viselkedését. A vizsgált rendszer méretének növelésével, termodinamikai határesetben akkor is kialakulhat nem analitikus viselkedés az alapállapot energiában, ha az energia szintek ténylegesen nem keresztesznek egymást (aszimptotikus nívókeresztesződés ld. 3.1. ábra).

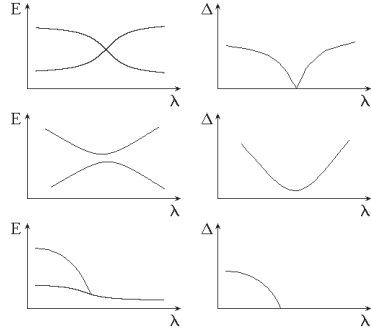
Az imént elmondottak alapján világos, hogy az alapállapotot és az első gerjesztett állapotot elválasztó  $\Delta$  energiagap, a minimális gerjesztési energia vizsgálata elvezet a kvantumos fázisátalakulási pontokhoz, ezért a dolgozatban tárgyalt valamennyi modell kapcsán vizsgáltuk a gapeket (spin-, töltés- és töltésátviteli gapek).

Véges méretű rendszerekkel dolgozva a kritikus pontban legtöbbször nem következik be ténylegesen az energianívók kereszteződése, így *elsőrendű* átalakulásnál, a 3.1. ábrának megfelelően, a gap lokális minimuma jelzi számunkra a fázisátalakulást.

Az egyik fázisban degenerálttá váló alapállapottal járó *másodrendű* átalakulásnál azonban numerikusan jóval nehezebben kezelhető a helyzet. A kritikus pont felé haladva a fluktuációkat jellemző karakterisztikus mennyiség a  $\xi$  korrelációs hossz divergál, azaz eltűnik a karakterisztikus hullámszám,  $\xi^{-1} \sim |\lambda - \lambda_c|^\nu$ , miközben a  $\lambda_c$  fázisátalakulási pontot elérve tetszőleges kis energiával gerjeszthetővé válik a rendszer,  $z^\nu$  exponenssel záródik a  $\Delta \sim |\lambda - \lambda_c|^{2\nu} \sim \xi^{-2}$  energiagap, így a karakterisztikus energiaskála is megszűnik.<sup>1</sup> Mindez azt jelenti, hogy a  $\Delta$  energiagap egyben a folytonos fázisátalakulást jellemző rendparaméter is. Így tehát, elméletileg, pusztán a gapeket analizálva eljuthatunk a vizsgált modellhez tartozó fázisdiagramig.

A gyakorlatban azonban az erősen korrelált fermion- vagy spinrendszerek gap analízise rendkívül bonyolult feladat, ugyanis a modellek döntő része nem oldható meg egzaktul, így a gerjesztési spektrumot numerikusan határozzuk meg, a termodinamikai határesetet pedig véges rendszereken számolt értékekből extrapoláljuk. Így sok esetben a  $10^2 - 10^3$  rácspontot tartalmazó láncokon végzett számításokból sem tudunk egyértelmű következtetést levonni a kvantumrendszer fázisátalakulásait illetően.

Erre a problémára kínál alternatív megoldást Wu, Sarandy és Lindar [Wu, 2004]-ben, ahol az alapállapot energiája valamely kontrollparaméter ( $\lambda$ ) függésének és annak deriváltjának fázisátalakulási pontban mutatott nem analitikus viselkedése és a kvantumállapot



**3.1. ábra.** Alacsony hőmérsékleten végbemenő kvantum fázisátalakulás. A  $H(\lambda)$  Hamilton-operátor legalacsonyabb energia sajátértékei ( $E$ ) és a  $\Delta$  energiagap a  $\lambda$  dimenziótlan csatolási állandó függvényében ábrázolva. Felül: nivó kereszteződéssel járó elsőrendű fázisátalakulás. Középen: elkerült, aszimptotikus nivó kereszteződés, szintén első rendű az átalakulás. Alul: degenerálttá váló alapállapot, záródó energiagap, az átalakulás folytonos.

<sup>1</sup>A kritikus exponensek értéke univerzális, független a mikroszkopikus leírástól, azaz magától a Hamilton-operátortól.

összefonódottságának mértékében bekövetkező diszkontinuitása között közvetlen kapcsolatot mutatnak meg. Ezt mi is kihasználtuk a dolgozatban tárgyalt modellek vizsgálatakor, így a fejezet további részében ezzel a módszerrel fogunk megismerkedni.

### 3.1. A Neumann-entrópiák

Wu és kollégái,  $S = 1/2$  spinekkel dolgozva (az  $S = 1/2$  létramodellen és az Ising-láncon mutatták be módszerüket), a versengést (concurrence) választották az összefonódottság mértékéül, amit az alábbi

$$C_{i,j} = \max(\gamma_{i,j}^1, \gamma_{i,j}^2, \gamma_{i,j}^3, \gamma_{i,j}^4, 0)$$

összefüggés definiál.  $\gamma_{i,j}^\alpha$  ( $\alpha \in [1..4]$ ) az  $R(\rho_{i,j}) := \rho_{i,j}(\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho_{i,j}^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)$  operátor sajátértékeinek gyökei.  $\gamma_{i,j}^\alpha \leq \gamma_{i,j}^\beta$ , ha  $\alpha > \beta$ ,  $\rho_{i,j}^*$  pedig a  $\{|\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle\}$  standard bázison kifejtett  $\rho_{i,j}$  kétrészecskés sűrűségmátrix komplex konjugáltja.  $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ , így a  $(\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho_{i,j}^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)$  operátor a két  $S = 1/2$  spinű részecskén értelmezett időtükrözés operátora, mely természetesen a spinek irányultságát is megváltoztatja.

Wu-ék cikkét követően többen is sikerrel alkalmazták a versengést különböző spinmodellek fázisainak vizsgálatánál [Os, 2002, Am, 2002, Sy, 2003, Gu, 2003, Vi, 2004, Ro, 2004, Ya, 2005]. A sűrűségmátrixszal súlyozott,  $S = 1/2$  spinoperátorokból ( $\sigma_y$ ) felépített spinflip-operátor sajátérték spektrumával definiált összefonódottsági mértékből jól kiolvasható a kritikus pontban megjelenő hosszú távú korreláció, azonban definíciójából adódóan csak  $S = 1/2$  spinrendszerek esetén használható,  $S > 1/2$ , vagy fermionmodellek esetén az összefonódottság mértékét másképpen kell definiálni.

Zanardi [Za, 2002], illetve Gu és munkatársai [Gu, 2004] a Neumann-féle egyrácspon-entrópiát ajánlották az összefonódottság lokális mértékéül, amit, a versengéstől eltérően nem csak  $S = 1/2$  spinmodellek esetében tudunk értelmezni:

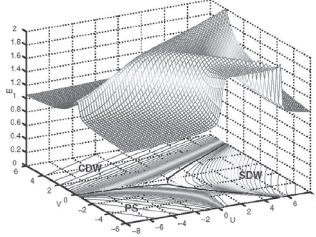
$$s_i = -\text{Tr } \rho_i \ln \rho_i, \quad (3.1)$$

ahol  $\rho_i$  a vizsgált lánc  $i$ -edik rácspontjának redukált sűrűségmátrixát jelöli. Ez a mennyiség monoton, véges amennyiben a kvantumállapot összefonódott, máskülönben zérus, így jó mértéke az összefonódottságnak. Gu az elsőszomszéd kölcsönhatással kiterjesztett Hubbard-modellen<sup>2</sup> mutatta be, hogy az egyrácspon-entrópia a lokális és a legközelebbi szomszéd

---

<sup>2</sup>A kiterjesztett Hubbard-modellt a  $\mathcal{H} = -\sum_{\sigma j \delta} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j+\delta,\sigma} + U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow} + V \sum_j n_j n_{j+1}$  Hamilton-

Coulomb-kölcsönhatás erősségének függvényében mutatott anomális viselkedése helyesen adja meg a spinsűrűség-hullám, a töltéssűrűség-hullám és a fázisszeparált alapállapotok fázishatárait. Az egyrácspontról-entrópia azonban nem jelezte szupravezető fázis jelenlétét.



**3.2. ábra.** Az egyrácspontról-entrópia ( $E$  jelöli az ábrán) a rácsponton belül ható ( $U$ ) és a legközelebbi szomszéd ( $V$ ) Coulomb kölcsönhatás erősségének függvényében ábrázolva a kiterjesztett Hubbard-modell esetében. Három szimmetriasértő fázist különíthetünk el: a spinsűrűség-hullám (SDW), a töltéssűrűség-hullám (CDW) és a fázisszeparált (PS) állapotokat. Forrás: S.-J. Gu, S.-S. Deng, Y.-Q. Li és H.-Q. Lin Phys. Rev. Lett. **93** 086402 (2004).

Legeza és Sólyom rámutatott arra, hogy előfordulhat olyan eset, mikor a (3.1) egyrácspontról-entrópia érzéketlen a szomszédos fázisokat megkülönböztető szimmetria sérülésére [Le, 2006]. Ilyen esetekben célravezető lehet két rácspont

$$s_{i,j} = -\text{Tr} \rho_{i,j} \ln \rho_{i,j}, \quad (3.2)$$

Neumann-entrópiájának vizsgálata [Le, 2006].  $\rho_{i,j}$  az  $i$ -edik és  $j$ -edik rácspontok redukált sűrűségmátrixát jelöli. Ezt bizonyítandó Legeza és Sólyom sikeresen meghatározták a  $j = i + 1$  kétrácspont-entrópia, azaz a két szomszédos rácspont Neumann-entrópiájának viselkedését vizsgálva a bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  spinmodell, az ionos Hubbard- és a donor-akceptor modellek fázisait, mely utóbbiakra az irodalomban korábban egymásnak ellentmondó eredmények kerültek publikálásra.

## 3.2. Fázisátalakulások és Neumann-entrópiák

Láttuk tehát, hogy a kvantumrendszer összefonódottsága fontos szerepet játszik a kvantum fázisátalakulásokban, így az összefonódottság mértékéül szolgáló Neumann-féle ent-

---

ropia operátor definiálja, ahol  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ,  $\delta = \pm 1$ , a  $c_{j,\sigma}^\dagger$  és  $c_{j,\sigma}$  operátorok pedig a szokásos keltő és eltüntető operátorok.

rópiák is kiválóan használhatóak a fázishatárok azonosítására. A most következő részben azt fogjuk áttekinteni, hogy mi is áll a fent bemutatott gyakorlati alkalmazás hátterében, azaz hogyan hozható kapcsolatba az alapállapot energiája és a rendszer összefonódottsága.

Wu, Sarandy és Lindar gondolatmenetét követve induljunk ki mi is a kétrészecske-kölcsönhatást figyelembe vevő legáltalánosabb Hamilton-operátorból, azaz legyen

$$\mathcal{H} = \sum_i \sum_{\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\beta}^i |\alpha_i\rangle \langle \beta_i| + \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ij} |\alpha_i\rangle |\beta_j\rangle \langle \gamma_i| \langle \delta_j| \quad (3.3)$$

ahol  $1 \leq i, j \leq N$  az  $N$  rácspontból álló rendszer rácspontjait indexeli,  $\{|\alpha_i\rangle\}$ ,  $\{|\beta_j\rangle\}$ ,  $\{|\gamma_i\rangle\}$  és  $\{|\delta_j\rangle\}$  pedig a Hilbert-tér bázisvektorai, az  $i$ -edik rácspont kvantumállapotait jelölik.

Kvantumos fázisátalakulást a rendszer Hamilton-operátorában szereplő valamely  $\lambda$  ( $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\lambda)$ ) paraméter folytonos változtatásakor tapasztalunk, amikor a kérdéses paraméter eléri a  $\lambda_c$  kritikus értéket. Elsőrendű fázisátalakulás esetén az  $E_{\text{GS}}$  alapállapot energiája  $\lambda$  szerinti első deriváltjában következik be szakadás, míg másodrendű átalakulás esetén a második derivált divergál, vagy ugrik [Re, 1998]. Így a következő lépésünk az

$$E_{\text{GS}}(\lambda) = \langle \psi | \mathcal{H}(\lambda) | \psi \rangle \quad (3.4)$$

várható érték kiszámítása lesz ( $|\psi\rangle$  a  $\mathcal{H}$  Hamilton-operátor alapállapot hullámfüggvénye).

Az  $E_{\text{GS}}$  alapállapot energiája várható értékbe helyettesítve a (3.3) Hamilton-operátort, a  $\rho_{i\beta}^{\beta\alpha} = \text{Tr}_j \rho_{i,j} = \langle \psi | \alpha_i \rangle \langle \beta_i | \psi \rangle$  egyrácspontos, illetve a  $\rho_{i,j}^{\delta\alpha\beta} = \text{Tr}_{k \in \{1,2,\dots,N\} \setminus \{i,j\}} |\psi\rangle \langle \psi| = \langle \psi | \alpha_i \beta_j \rangle \langle \gamma_i \delta_j | \psi \rangle$  kétrácspontos redukált sűrűségoperátorok mátrix reprezentációi jelennek meg (3.4)-ben, így azt az

$$E_{\text{GS}} = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle = \text{Tr} (\mathcal{H} | \psi \rangle \langle \psi |) = \sum_i \text{Tr} (\epsilon^i \rho_i) + \sum_{ij} \text{Tr} (V^{ij} \rho_{i,j}) \quad (3.5)$$

alakra hozhatjuk. Mielőtt továbbsmennénk, elvégezhetünk egy egyszerűsítést. Ha az egyetlen rácsponthoz kötődő csatolási állandók  $\epsilon^i$  mátrixát kiterjesztjük és bevezetünk egy  $U^{ij}$   $q^2 \times q^2$  dimenziós mátrixot, mely elemeit a  $U_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ij} = \epsilon_{\alpha\gamma}^i \delta_{\beta\delta}^j / N_i + V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ij}$  összefüggés adja meg ( $\delta_{\beta\delta}^j$  a  $j$ -edik rácsponton értelmezett Kronecker szimbólumot, míg  $N_i$  az  $i$ -edik rácsponttal kölcsönható részecskék számát jelöli.), akkor a (3.5)-ben szereplő két összegzést összevon-

hatjuk és a (3.3) általános kétrészecske-kölcsönhatást leíró Hamilton-operátor alapállapotú energiáját közvetlenül a kétrácpontos redukált sűrűségmátrix függvényeként kezelhetjük<sup>3</sup>:

$$E_{\text{GS}}(\rho_{i,j}) = \sum_{ij} \text{Tr} (U^{ij} \rho_{i,j}) . \quad (3.6)$$

A továbbiakban az alapállapotú energia (3.6) alakját fogjuk használni, így a kétrácpontos sűrűségmátrixszal definiált kétrácpont-entrópia anomáliáit fogjuk kapcsolatba hozni  $E_{\text{GS}}$  nem analitikus viselkedésével. Természetesen a bizonyítás minden további nélkül megismételhető abban az esetben is, ha az egyrácpont-entrópiát használjuk a kvantumrendszer összefonódottságának mérésére. Ebben az esetben azonban a (3.5) alapállapotú energiában csak az egyrácpontos redukált sűrűségoperátor jelenik meg. Ez pedig azt jelenti, hogy ha  $E_{\text{GS}}$  anomális viselkedése éppen (3.5) kétrácpontos sűrűségmátrixszal felírt, a kétrészecske-kölcsönhatási energiát kifejező tagjából ered, akkor azt nem fogjuk tudni összekapcsolni az egyrácpont-entrópia nem analitikus viselkedésével, tehát lesznek olyan esetek, mikor az egyrácpontos entrópiában nem fogjuk látni a fázisátalakulást.

Mivel a fázisátalakulási pontban az  $E_{\text{GS}}$  alapállapotú energia  $\lambda$  szerinti első (elsőrendű) átalakulás), illetve második deriváltja (másodrendű átalakulás) nem analitikus, az előkészületek utolsó lépéseként tegyük fel, hogy  $\epsilon_{\alpha\beta}^i$  és  $V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ij}$  sima folytonos függvényei a  $\lambda$  csatlósnak és számítsuk ki a (3.6) alapállapotú energia  $\partial E_{\text{GS}}/\partial\lambda$  és  $\partial^2 E_{\text{GS}}/\partial\lambda^2$  deriváltjait!

1. Ha  $|\psi\rangle$  a (3.3) Hamilton-operátor alapállapotú hullámfüggvénye, akkor, felhasználva, hogy  $\frac{\partial}{\partial\lambda} \langle\psi|\psi\rangle = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial\lambda} E_{\text{GS}} = \langle\psi|\frac{\partial}{\partial\lambda}\mathcal{H}|\psi\rangle$ , (3.6)-ból közvetlenül megkaphatjuk az alapállapotú energia első

$$\frac{\partial E_{\text{GS}}(\rho_{i,j})}{\partial\lambda} = \sum_{ij} \text{Tr} \left( \frac{\partial U^{ij}}{\partial\lambda} \rho_{i,j} \right) \quad (3.7)$$

deriváltját<sup>4</sup>, amiből rögtön látszik, hogy az elsőrendű fázisátalakulás esetén  $\lambda_c$ -ben fellépő nem analitikusság valamely  $\rho_{i,j}$  sűrűségmátrix nem analitikus viselkedésével hozható kapcsolatba.

<sup>3</sup>Természetesen a (3.6)-ben felírt összefüggés nem csak a rendszer alapállapotában és nem csak a Hamilton-operátorra érvényes, továbbá könnyen általánosíthatjuk  $n$ -részecske-kölcsönhatást leíró Hamilton-operátorokra is. Legyen például  $O$  egy háromrészecske-kölcsönhatást leíró operátor és  $\Psi$  a Hamilton-operátor egy sajátállapota. Ekkor az  $O$  operátor várható értéke  $\langle\Psi|O|\Psi\rangle = \sum_{ijk} \text{Tr} [O^{ijk} \rho_{i,j,k}]$  alakban írható fel, ahol  $\rho$  a sűrűségmátrixot jelöli. Mindez  $d$ -szeresen degenerált energiaszint esetén is igaz, ekkor a sűrűségmátrix  $\rho_{i,j,k} = \frac{1}{d} \sum_{p=1}^d \rho_{i,j,k}^p$  alakú, ahol  $\rho_{i,j,k}^p$  a degenerált  $\Psi_p$  sajátállapothoz tartozó redukált sűrűségoperátor.

<sup>4</sup>Ebből az is leolvasható, hogy  $\sum_{ij} \text{Tr} (U^{ij} \frac{\partial}{\partial\lambda} \rho_{i,j}) = 0$ .

2. Az alapállapot energiája második deriváltját közvetlenül (3.7)-ből számolhatjuk:

$$\frac{\partial^2 E_{\text{GS}}(\rho_{i,j})}{\partial \lambda^2} = \sum_{ij} \text{Tr} \left( \frac{\partial^2 U^{ij}}{\partial \lambda^2} \rho_{i,j} \right) + \sum_{ij} \text{Tr} \left( \frac{\partial U^{ij}}{\partial \lambda} \frac{\partial \rho_{i,j}}{\partial \lambda} \right). \quad (3.8)$$

Láthatjuk, hogy ebben az esetben is, amíg  $U^{ij}$  sima, folytonos függvénye  $\lambda$ -nak és  $\rho_{i,j}$  is véges a  $\lambda_c$  kritikus pontban,  $\partial^2 E_{\text{GS}}/\partial \lambda^2$  ugrása, vagy divergálása valamely  $\partial \rho_{i,j}/\partial \lambda$  nem analitikus viselkedésével hozható kapcsolatba.

Mindezen előkészületeket követően a következő állítást fogalmazhatjuk meg:

**Állítás** Amennyiben az alábbiakban felírt három feltétel teljesül, akkor a kétrácpont-entrópia szakadása szükséges és egyben elégséges egy elsőrendű fázisátalakulás jelzéséhez. Továbbá a kétrácpont-entrópia  $\lambda$  szerinti első deriváltjának ugrása vagy divergálása szükséges<sup>5</sup> és egyben elégséges egy másodrendű fázisátalakulás jelzéséhez.

- (a). A  $\partial E_{\text{GS}}/\partial \lambda$  [ $\partial^2 E_{\text{GS}}/\partial \lambda^2$ ] mennyiség elsőrendű [másodrendű] fázisátalakulással járó szakadása kizárólag a  $\rho_{i,j}$  sűrűségmátrixszal hozható összefüggésbe, azt nem okozhatják csupán a (3.7)-ben [(3.8)-ban] kijelölt műveletek, például az összegzés. Hasonlóan, a kétrácpont-entrópia ugrása [ $\partial s_{i,j}/\partial \lambda$  derivált ugrása vagy divergálása] kizárólag a  $\rho_{i,j}$  sűrűségmátrixszal hozható összefüggésbe, azt nem származhat pusztán más műveletek ( $\text{Tr}$ ,  $\ln$ ) elvégzéséből.
- (b). Elsőrendű [másodrendű] átalakulás esetén a (3.7)-ben [(3.8)-ban] megjelenő nem analitikus viselkedést okozó  $\rho_{i,j}$  mátrixelemek [ $\partial \rho_{i,j}/\partial \lambda$  deriváltak] nem tűnnek el véletlenül és nem is oltják ki egymást a kétrácpont-entrópiát definiáló (3.2) összefüggésben [a kétrácpont-entrópia  $\lambda$  szerinti első deriváltjában].
- (c). Elsőrendű [másodrendű] átalakulás esetén a (3.2)-ben [a  $\partial s_{i,j}/\partial \lambda$  deriváltban] megjelenő, a kétrácpont-entrópia nem analitikus viselkedését okozó  $\rho_{i,j}$  mátrixelemek nem tűnnek el véletlenül és nem is oltják ki egymást a (3.7) [a (3.8)] formulában.

Ezek a feltételek kizárják a nem analitikus viselkedés véletlen, vagy az összefonódottság mértékének definíciójából adódó megjelenését, kiemelik, hogy a kvantum fázisátalakulások és az összefonódottság közötti kapcsolatot értelmezhetjük kizárólag az alapállapot redukált sűrűségmátrixon keresztül.

<sup>5</sup>A gyakorlati számítások során ez az  $s_{i,j}(\lambda)$  függvény éles maximumaként jelenik meg.

**Bizonyítás – elsőrendű fázisátalakulás** Először a szükségességet, majd az elégségességet fogjuk belátni.

- Elsőrendű fázisátalakulás esetén (3.7) nem analitikus az átalakulási pontban.  $\stackrel{(a)}{\Rightarrow}$  Valamely  $\rho_{i,j}$  legalább egy mátrixeleme nem analitikus  $\lambda_c$ -ben.  $\stackrel{(b)}{\Rightarrow}$  A nem analitikus viselkedés a kétrácpont-entrópiában is megjelenik.
- A  $\text{Tr}$  lineáris operáció, az  $\ln$  pedig folytonos, szigorúan monoton függvény, így a kétrácpont-entrópiában fellépő nem analitikus viselkedés legalább egy nem analitikus  $\rho_{i,j}$  mátrixelem létezését jelzi.  $\stackrel{(c)}{\Rightarrow}$  (3.7) nem analitikus ami elsőrendű fázisátalakulásra utal.

**Bizonyítás – másodrendű fázisátalakulás** Ismételtén a szükségesség belátásával kezdjük, majd megvizsgáljuk az elégségességet kérdését.

- Másodrendű fázisátalakulás esetén (3.8) nem analitikus  $\lambda_c$ -ben.  $\stackrel{(a)}{\Rightarrow}$  Amennyiben minden  $\rho_{i,j}$  folytonos, létezik olyan  $\partial\rho_{i,j}/\partial\lambda$  derivált ami ugrik, vagy divergál az átalakulási pontban.  $\stackrel{(b)}{\Rightarrow}$  A nem analitikus viselkedést a (3.2) kétrácpont-entrópia  $\frac{\partial s_{i,j}(\rho_{i,j})}{\partial\lambda}$  deriváltjában is megjelenik.
- $\frac{\partial s_{i,j}(\rho_{i,j})}{\partial\lambda} = \sum_{ab} \frac{\partial s_{i,j}(\rho_{i,j})}{\partial\rho_{i,j}^{ab}} \frac{\partial\rho_{i,j}^{ab}}{\partial\lambda}$ -nak ugrása van, vagy divergál a  $\lambda_c$  átalakulási pontban.  $\stackrel{(a)}{\Rightarrow}$  Ezt a nem analitikus viselkedést valamely  $\left[\frac{\partial\rho_{i,j}^{ab}}{\partial\lambda}\right]_{\lambda_c}$  derivált okozza.  $\stackrel{(a)}{\Rightarrow}$  (3.8) nem analitikus, ami másodrendű fázisátalakulást jelez.

Ezzel beláttuk, hogy az alapállapot energiája valamely csatolásiparaméter-függésének és deriváltjainak a fázisátalakulási pontban mutatott nem analitikus viselkedése és a kvantumállapotok összefonódottságának mértékében bekövetkező diszkontinuitás között közvetlen kapcsolat van. Ez pedig nagyon hatékony eszközt jelent az erősen korrelált fermion- vagy spinrendszerek fázishatárainak meghatározása során. A módszer előnyeiről és alkalmazásáról a következő szakaszban lesz szó.

### 3.3. Neumann-entrópiák a DMRG algoritmusban

A Neumann-entrópiák vizsgálata azért jelent nagy segítséget az erősen korrelált kvantumrendszerek fázisdiagramjának meghatározásakor, mert már viszonylag rövid láncokkal dolgozva is megjelennek bennük a fázishatárokat jelző nem analitikus viselkedésre utaló jelek



(pl.: extrémumok, gyors változások), ez pedig azt jelenti, hogy már rövidnek mondható számítási időt követően is elfogadható kvalitatív képet alkothatunk a vizsgált rendszerrel. Azonosíthatjuk a fázisokat és meghatározhatjuk a további számítások szempontjából érdekes, a fázisátalakulási pontokat tartalmazó paramétertartományokat. Ezzel nagymértékben növelhetjük a numerikus számítások hatékonyságát, illetve eddig kezelhetetlennek tűnő kvantumrendszerekről is kaphatunk elfogadható kvalitatív eredményeket.

Legeza és Solyom [Le, 2006]-ben arra is rámutatott, hogy a DMRG algoritmust alkalmazva a Neumann-entrópiák viselkedésének vizsgálata különösen hatékony, hiszen az algoritmus minden lépésében kiszámítjuk egy  $B_l \bullet_b \bullet_l R_l$  szuperblokk-konfiguráció  $\psi$  alapállapotú (vagy valamely gerjesztett állapothoz tartozó) hullámfüggvényét, így a szuperblokk  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  sűrűségmátrixa is rendelkezésünkre áll. Ebből egyszerűen származtathatjuk akár a blokkok  $\rho_{B_l \bullet_b} = \text{Tr}_{R_l} \text{Tr}_{\bullet_l} \rho$ ,  $\rho_{B_l} = \text{Tr}_{R_l} \text{Tr}_{\bullet_l} \text{Tr}_{\bullet_b} \rho$ ,  $\rho_{R_l \bullet_l} = \text{Tr}_{B_l} \text{Tr}_{\bullet_b} \rho$ ,  $\rho_{R_l} = \text{Tr}_{B_l} \text{Tr}_{\bullet_b} \text{Tr}_{\bullet_l} \rho$ , akár a blokkok közötti  $\bullet$  részecskék  $\rho_{\bullet_b} = \text{Tr}_{R_l} \text{Tr}_{\bullet_l} \text{Tr}_{B_l} \rho$ ,  $\rho_{\bullet_l} = \text{Tr}_{B_l} \text{Tr}_{\bullet_b} \text{Tr}_{R_l} \rho$ ,  $\rho_{\bullet_b \bullet_l} = \text{Tr}_{B_l} \text{Tr}_{R_l}$  redukált sűrűségmátrixait, így gyakorlatilag minimális többlet számítási idő felhasználásával juthatunk a fázishatárok azonosításakor a Neumann-féle entrópiafüggvényekhez.

Doktori munkám során mi elsőszomszéd kétrészecske-kölcsönhatásokkal foglalkoztunk, így a kétrácpont-entrópiában is két szomszédos rácpont redukált sűrűségmátrixát vizsgáltuk:

$$s_{i,i+1} = -\text{Tr} \rho_{i,i+1} \ln \rho_{i,i+1} \quad (3.9)$$

Számításaink során a (3.1) egyrácpont- és a (3.9) kétrácpont-entrópiákat vizsgáltuk, melyek, az alkalmazás szempontjából (csak véges láncokon tudunk számolni) lényeges tulajdonságait az alábbi két pontban foglalhatjuk össze:

1. Egyetlen rácpont Neumann-entrópiáját az  $s_i = -\text{Tr} \rho_i \ln \rho_i$  összefüggés definiálja. A csatolási állandó függvényében ábrázolva az egyrácpont-entrópiának ugrása van a fázisátalakulási pontban, feltéve, hogy az átalakulás elsőrendű. Másodrendű fázisátalakulás esetén az egyrácpont-entrópia első deriváltjának termodinamikai határesetbeli ugrását elmosódott törés (cusp), legtöbbször lokális extrémum jelzi a fázishatáron.
2. A kétrácpont-entrópiát az  $s_{i,i+1} = -\text{Tr} \rho_{i,i+1} \ln \rho_{i,i+1}$  kifejezés adja meg. Akárcsak az egyrácpont-entrópia esetében, véges láncokkal számolva, a fázishatárt a kétrácpont-entrópia szakadása (elsőrendű átalakulás), vagy extrémuma (folytonos átalakulás) jelzi.

Mindkét mennyiséget a vizsgált láncok közepén ( $i = N/2, N/2 + 1$ ) számoljuk, így eleendően hosszú láncot választva (a rendszer koherencia hosszához viszonyítva), a nyitott határfeltétel esetén fellépő végesméret-hatásoktól eltekinthetünk.

A dolgozat további részeiben sokszor elő fog kerülni az „entrópiafüggvény” kifejezés, anélkül, hogy részleteznénk, minek a függvényében vizsgáljuk az egyrácpont-, illetve kétrácpont-entrópiákat. Ilyenkor mindig a vizsgált modellhez kapcsolódó valamely csatlóási állandó, például az egy rácponton belül értelmezett  $U$  Coulomb-kölcsönhatás, függvényében beszélünk a Neumann-entrópiák viselkedéséről.

### 3.4. Dimer rendparaméter

Most már tudjuk, hogy az imént bevezetett (3.1) és (3.9) rácpont-entrópiákat a DMRG algoritmus minden lépésében, minimális többletszámítással meghatározhatjuk és fázishatárok után kutatva érdemes is meghatároznunk. Az ilyen módon rendelkezésünkre álló kétrácpont-entrópia értékekkel definiálhatjuk a rendszerben fellépő translációs szimmetria sérülését mutató rendparamétert [Sz, 2007], például a dimer rendet jelző rendparamétert is.

Ennek megfelelően a kétrészecske-kölcsönhatások következtében dimerizálódó alapállapotot a kétrácpont-entrópia értékek is jelzik nekünk. A (2.10) definícióból azt is tudjuk, hogy dimerizált állapotban a szomszédos  $(i - 1, i)$  és  $(i, i + 1)$  rácpontpárok közötti kölcsönhatási energia eltér és ez az eltérés a rácpontok redukált sűrűségmátrixában és így a (3.9) kétrácpont-entrópiában is megjelenik: ha dimerizált a rendszer, a lánc közepén meghatározott  $s_{i,i+1}$  különböző értéket vesz fel  $i = N/2$  és  $i = N/2 + 1$  esetén, jelezvén a translációinvariancia sérülését. Azaz, a DMRG algoritmussal dolgozva célszerű a kétrácpont-entrópiák különbségeként felírni a

$$D_s(N) = s_{\frac{N}{2}, \frac{N}{2}+1} - s_{\frac{N}{2}+1, \frac{N}{2}+2} \quad (3.10)$$

dimer rendparamétert. A dolgozat további részeiben a szomszédos kötések közötti energiakülönbség várható értékeként definiált (2.10) dimer rendparamétert és a kétrácpont-entrópiák (3.10) dimerizációját megkülönböztetésül  $D$ -vel és  $D_s$ -sel fogjuk jelölni. Most pedig következzen a bevezetésben felvetett témák részletes vizsgálata!

## 4. fejezet

# Spinnematikus fázis a bilineáris-bikvadratikus $S = 1$ spinmodellben

Az utóbbi két évtizedben került az érdeklődés középpontjába a kvantum spinláncok tulajdonságainak vizsgálata. Az izotrop módon csatolt  $S = 1/2$  spinek leírásának legáltalánosabban modelle a Heisenberg-modell.  $S = 1/2$ -nél nagyobb spinek esetén azonban magasabb spinhatványok is szerepelhetnek a Hamilton-operátorban. Tekintsük az  $S = 1$  esetet! Ha a legáltalánosabb izotrop csatolást feltételezzük a szomszédos spinek között, akkor a bilineáris tag mellett egy bikvadratikus tag is megjelenik a rendszer Hamilton-operátorában, amely az alábbi alakban írható fel:

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_{i,i+1} = \sum_i [\cos \theta (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) + \sin \theta (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2] . \quad (4.1)$$

A bilineáris és bikvadratikus tagok csatolási állandóinak  $\cos \theta$ , illetve  $\sin \theta$  alakban történő felírásával, a  $\theta$  paraméter folytonos változtatása mellett igen gazdag fázisdiagramhoz jutunk, mely tekintetében azonban nem teljes az egyetértés.

A következő, 4.1. szakaszban a modell ismert fázisait mutatjuk be, miközben kiemelten foglalkozunk a fázisdiagram mostanáig kérdéses  $\theta \approx -3\pi/4$  tartományával, aminek vizsgálata képezi e fejezet tárgyát. A DMRG algoritmus paraméterezésének ismertetését és a módszer hibájának vizsgálatát a 4.2.1. szakasz tartalmazza. A 4.2.2. és 4.2.3. szakaszokban pedig a spinnematikus fázis jelenlétét jelző legmegfelelőbb indikátormennyiség kiválasztával foglalkozunk. A 4.3. szakaszban a numerikus számításaink és azok eredménye

olvasható, míg a 4.4. szakasz vizsgálataink összefoglalását, a végső konklúziót tartalmazza.

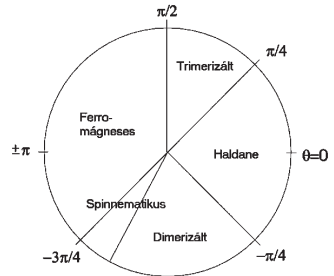
Én magam e kérdéskör kapcsán sajátítottam el a DMRG módszert és a különféle végesméret-skálázási eljárásokat. A fejezetben ismertetett eredmények közül a  $\theta = -\pi/2$  pontban az egzakt eredmények és a DMRG módszerrel meghatározott értékek, valamint a lokális mennyiségek és energiagapok skálázódásának összehasonlítása tekinthető önálló eredménynek.

## 4.1. A bilineáris-bikvadratikus modell ismert fázisai

A bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  spinmodell sematikus fázisdiagramját a 4.1. ábrán mutatjuk be. A fenti paraméterezés mellett a  $\theta = 0$  paraméterérték az  $S = 1$ -es spinű Heisenberg-modellt reprezentálja, az energiaspektrum gapes, a csatolás antiferromágneses, míg  $\theta = \pm\pi$ -nél a rendszer ferromágneses. Mindkét fázis kiterjedt a paraméterterben, a ferromágneses fázis a  $\pi/2 < \theta < \pi$  és  $-\pi < \theta < -3\pi/4$  paraméterértékek mellett stabil, míg a  $-\pi/4 < \theta < \pi/4$  tartományban a Haldane-fázis váltja fel a klasszikus antiferromágneses rendet (a rendszer translációinvariáns, a spektrum gapes – Haldane-gap). A fázishatárok a modell speciális pontjai, mivel a  $\theta = \pm\pi/4$ ,  $-3\pi/4$  és  $-\pi/2$  pontokban ismert (Bethe-ansatz egyenletekből számítható) a bilineáris-bikvadratikus modell egzakt megoldása [La, 1974, Su, 1975, Ta, 1982, Ba, 1983].<sup>1</sup>

A Haldane-gap  $\theta = \pi/4$ -nél záródik, a spektrumban 3 lágy módus jelenik meg  $k = 0$ -nál és  $\pm 2\pi/3$ -nál. A rendszer kritikus marad a fázistér teljes  $\pi/4 < \theta < \pi/2$  intervallumán [Fá, 1991, It, 1997]. A lágy módusok végig a  $k = 0, \pm 2\pi/3$  momentumértékeknél maradnak, a translációinvariancia ebben az ún. trimerizált fázisban is megmarad. A korrelációk  $3a$  periódussal oszcillálva, hatványfüggvény szerint csengenek le, innen kapta a fázis a nevét.

A gap  $\theta = -\pi/4$ -nél is eltűnik, de azonnal újra nyílik, a spektrum nem lágyul a fázis-



4.1. ábra. A bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  spinmodell sematikus fázisdiagramja a  $\theta$  paraméter függvényében.

<sup>1</sup>Ezt ki is használtuk a numerikus számítások során, a megfelelő rendparaméter megválasztásánál, a számítások pontosságának becslésénél.

tér  $\theta < -\pi/4$  tartományában, azonban a translációinvariancia megszűnik ( $\langle \mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1} \rangle \neq \langle \mathbf{S}_{i+1}, \mathbf{S}_{i+2} \rangle$ ). Ebben a  $\theta < -\pi/4$  tartományban alakul ki a ún. dimerizált fázis kétszeresen degenerált alapállapota [Af, 1987].<sup>2</sup> A dimerizált fázis tulajdonságai legjobban a  $\theta = -\pi/2$  pontban ismertek (9 állapotú kvantum Potts-modellbe képezhető [Pa, 1987, Ba, 1989, Kl, 1989]), ebben a pontban egzaktul számolható az alapállapoti energia, a gap, a korrelációs hossz és dimer rend [Xi, 1993].

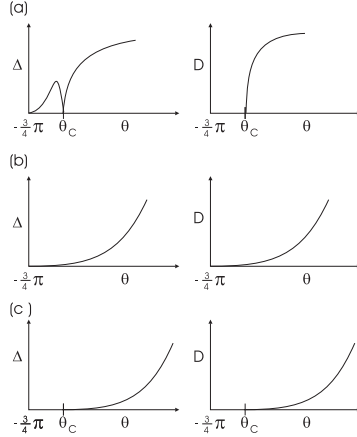
Habár a ferromágneses, a Haldane- és a kritikus trimerizált fázis tulajdonságairól részletes ismereteink vannak, a fázisok határai ismertek, mégsem állíthatjuk, hogy a bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  spinmodell fázisdiagramját tekintve teljes az egyetértés. A szakirodalomban felvetődött egy, a dimerizált és a ferromágneses tartomány között elhelyezkedő, a fázistér szűk,  $\theta \approx -3\pi/4$  körüli, tartományát elfoglaló, újabb fázis létezése.

1990-ben Chubukov, a ferromágneses instabilitási pont környezetében fellépő fluktuációk tanulmányozása során [Ch, 1990], felvetette egy gapes, nem dimerizált nematikus ( $\langle \mathbf{S}_i \rangle = 0$ ,  $\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle \neq 0$ ) fázis létezését a fázistér ferromágneses és dimerizált tartománya között. Valóban, a rendszer szimmetriatulajdonságai is ezt sugallják: ugyanis  $\theta \approx -3\pi/4$ -nél a ferromágneses rend translációinvarianciája és a dimerizált fázis  $SU(2)$  szimmetriája is spontán módon sérül. E két szimmetriatulajdonság pedig nincsen összefüggésben, így nem látszik indokoltnak mindkét szimmetria sérülése egy fázisátalakulás során. Chubukov feltevézése szerint a  $\theta$  paramétert csökkentve, egy kritikus,  $\theta_c > -3\pi/4$ , értékénél eltűnik a dimer rend és záródik az energiagap is, az alapállapot degenerációja megszűnik, a rendszer translációinvariánsá válik. Tovább csökkentve  $\theta$  értékét a gap újrainyílik, míg a dimer rend már nem tér vissza. Pontosan  $\theta = -3\pi/4$ -nél, a ferromágneses fázis határán, a gap ismét záródik, a dimerizáció továbbra sem jelenik meg. Ezt az elképzelést követhetjük nyomon a 4.2. (a) ábrán.

Később a nemlineáris  $\sigma$ -modell alkalmazó térelméleti számítások is alátámasztották Chubukov elképzelését [Iv, 2003], azonban ezek a számítások translációinvariáns alapállapotot feltételeztek és nem vizsgálták annak stabilitását, nem vették figyelembe a translációinvariancia spontán sérülésének lehetőségét.

Sólyom Jenő, Legeza Örs és Fáth Gábor szintén vizsgálta Chubukov feltevését a kilencvenes évek közepén [Fá, 1995, Le, 1997]. Numerikus módszerekkel vizsgálták az alapállapot degenerációját, a dimer rendparamétert és az alapállapoti korrelációkat, illetve az energiagap nyílását. E mennyiségek viselkedése nem jelezte a keresett nem dimerizált kvantum nematikus fázis meglétét, az energiagap és a dimer rendparaméter viselkedését láthatjuk

<sup>2</sup>A dimerizációt a kötési energia alternációjával definiálhatjuk (2.4. szakasz).



**4.2. ábra.** Az energiagap ( $\Delta$ ) és a dimer rendparaméter ( $D$ ) sematikus ábrázolása a  $\theta$  paraméter függvényében a ferromágneses és a dimerizált fázis határán. (a) Chubukov javaslata (gapes, nem dimerizált nematikus fázis). (b) korábbi numerikus számítások eredménye (direkt átmenet a dimerizált és a ferromágneses fázis között). (c) kvantumos Monte-Carlo-szimulációt és DMRG algoritmust alkalmazó számítások eredménye (kritikus, nem dimerizált fázis).

a 4.2. (b) ábrán. Mindkét mennyiség, a gap és a dimerizáció is csak  $\theta = -3\pi/4$ -nél tűnik el, semmi jelét nem találjuk záródó, majd újra nyíló energiagapnak, a dimerizáció megjelelése egybeesik a ferromágneses rend instabillá válásával. Azonban a szerzők, mivel a gapek és a rendparaméterek rendkívül kicsik a nematikus fázis feltételezett helyén, a numerikus számítások hibáját figyelembe véve nem zárták ki a nem dimerizált spinnematikus fázis létezését egy szűk paramétertartományban.

Újabb numerikus számítások szerint a Chubukov-féle  $\theta_c$ -nél záródó majd azonnal újranyíló gap nem teljesen felel meg a valóságnak. Kvantumos Monte-Carlo [Ka, 2002] és DMRG algoritmust alkalmazó számítások [Lä, 2003] egy egzotikus, kritikus fázist jeleztek kvadrupoláris korrelációkkal a ferromágneses és a dimerizált tartományok között. Az energiagap és a dimer rendparaméter viselkedését a 4.2. (c) ábrán követhetjük nyomon ebben a fázisban.  $\theta$  csökkentésével mind a dimerizáció, mind a gap egy  $\theta_c > -3\pi/4$  paraméterértéknél válik nullává, majd a  $\theta < \theta_c$  tartományban már sem a gap, sem a dimerizáció nem válik újra véggessé. Fontos megemlíteni, hogy Läuchli és munkatársai  $\theta_c = -0,67\pi$ -t jósoltak kritikus paraméterértékként.

A tudományos diskusszió ezen pontján kapcsolódtam be a bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  spinmodell nem dimerizált spinnematikus fázisának keresésébe. A számítási kapacitás gyors növekedésének köszönhetően, a DMRG algoritmust alkalmazva az eddigieknél jelentősen nagyobb méretű rendszereket tudtunk vizsgálni, így a termodinamikai határesetet is pontosabban tudtuk extrapolálni. A célunk az volt, hogy további bizonyítékot találjunk a kérdéses fázis létezésére. Vizsgálatainkat a nem dimerizált fázis feltételezett helyén, a  $\theta \gtrsim -3\pi/4$  tartományban végeztük, különösen ügyelve a numerikus pontosság kérdésére. Végso soron nem találtunk bizonyítékot a fázis létezésére, viszont sikerült tovább szűkítenünk a paramétertér azon tartományát, ahol létezhet a vitatott nematikus fázis, kérdésessé téve ezáltal annak létét.

## 4.2. Ellenőrzés a dimerizált fázisban

Az 4.2. ábrán jól látszik, hogy akár a  $\Delta$  energiagap, akár a  $D$  dimer rendparaméter megfelelően pontos meghatározása a ferromágneses fázishatár egy szűk környezetében elegendő annak eldöntéséhez, hogy a szakirodalomban közölt [Ch, 1990, Iv, 2003, Fá, 1995, Le, 1997, Ka, 2002] és a 4.2. ábrán összefoglalt konfigurációk közül melyik valósul meg. Ezért a 4.2.2. és a 4.2.3. szakaszokban részletesen meg fogjuk vizsgálni az energiagap és a dimer rendparaméter skálázási tulajdonságait a  $\theta = -\pi/2$  pontban, annak érdekében, hogy kiderüljön, melyik mennyiséggel érdemes dolgoznunk.

Azért választottuk éppen a  $\theta = -\pi/2$  paraméterértéket, mert ebben a pontban a bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  spinmodell energispektrumának egy része egzaktul megoldható [Pa, 1987, Ba, 1989, Kl, 1989, Xi, 1993]. Ismert az energiagap  $\Delta_{\text{egzakt}}^{\theta=-\pi/2} = 0,173178$ , a dimer rendparaméter  $D_{\text{egzakt}}^{\theta=-\pi/2} = 1,124378$  és a koherenciahossz  $\xi_{\text{egzakt}}^{\theta=-\pi/2} = 21,072$  egzakt értéke, így összehasonlíthattuk számításaink eredményét a pontos szám adatokkal. Ki fog derülni, hogy nyitott határfeltételt alkalmazva a kedvezőbb skálázási tulajdonságaiból adódóan a dimer rendparaméter ( $D$ ) jóval pontosabban számolható, mint az energiagap ( $\Delta$ ), így érdemes ezt a mennyiséget vizsgálni a továbbiakban.

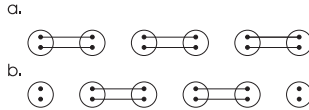
### 4.2.1. A numerikus módszer paraméterezése, pontossága

A DMRG algoritmus (2. fejezet) alkalmazása során minden sajátállapotot külön számítottunk. Az eljárás kettő, illetve három sweep elvégzése után konvergált. Egyaránt alkalmaztunk nyitott és periodikus határfeltételt, illetve számoltunk a standard eljárással [Wh, 1992] és alkalmaztuk a dinamikus blokkállapot-kiválasztást [Le, 2003, Le, 2004] is.

A standard eljárás során  $M = 500$  és  $M = 1000$  közötti blokkállapottal számoltunk. A legnagyobb,  $N = 500 - 1000$  rácspontból álló rendszerek esetén  $10^{-8}$  és  $10^{-9}$  között változott a vágási hibánk nyitott határfeltétel mellett. Periodikus határfeltételt alkalmazva ez a vágási hiba  $10^{-5}$  és  $10^{-7}$  közé nőtt.

Az abszolút hibánk becslése végett  $\theta = 0,7\pi$ -nél elvégeztünk néhány számítást: nyitott határfeltétel mellett számoltuk az alapállapot energiát és figyeltük annak változását a blokkállapotok számának függvényében. Azt tapasztaltuk, hogy  $M = 300$ -ról  $N = 500$ -ra növelve a megtartott blokkállapotok számát, az egy rácspontra eső energia csak az ötödik tizedes jegyében változott,  $\delta E(M = 300, M = 500) < 10^{-5}$ , míg  $M = 500$  állapot helyett  $N = 1000$  blokkállapotot megtartva, ugyan ez az energiaváltozás csak  $10^{-6}$  nagyságrendű, azaz  $\delta E(M = 500, M = 1000) < 10^{-6}$ .

A dinamikus blokkállapot-kiválasztás során az egy renormálási lépésben bekövetkező (2.7) kvantuminformáció-veszteséget  $\chi_{\max} = 10^{-8}$ -ban maximáltuk, azaz az iteráció minden lépésében teljesült a (2.8) reláció, miközben megköveteltük, hogy a blokkállapotok száma ne csökkenjen  $M_{\min} = 256$  alá. Ilyen feltételek mellett, nyitott határfeltételt alkalmazva  $M_{\max} = 600$  és  $M_{\max} = 1400$  között változott a blokkállapotok maximális száma, míg periodikus határfeltétel esetén  $M_{\max} = 1000 - 2500$  számú blokkállapottal kellett számolnunk.



4.3. ábra. A dimerizált fázis két tipikus alapállapotú vegyértékkötés-konfigurációja páros számú rácspontot tartalmazó nyitott lánc esetén.

A 4.3. ábrán a dimerizált fázis két tipikus alapállapotú vegyértékkötés-konfigurációja látható páros számú rácspontot tartalmazó nyitott láncok esetén. A két szingulett állapot energiája nem egyezik meg, termodinamikai határesetben is véges energiagap szeparálja őket, a rendszer alapállapotát a 4.3. a. konfiguráció jelenti. Véges rendszerek esetén, periodikus határfeltétel mellett azonban a két különböző dimerizált konfiguráció összekeveredik és helyreáll a translációinvariancia. Elméletileg a dimer rendnek tetszőleges véges gyűrű esetén el kell tűnnie, ez pedig lehetőséget teremt az abszolút hibánk becslésére: dinamikus blokkállapot-kiválasztást alkalmazva ( $\chi_{\max} = 10^{-6}$ ,  $M_{\min} = 256$ ) egészen  $N = 200$  rácspont lánc hosszúságig számoltuk a  $D_i$  dimer rend profilt a  $-0,75\pi \leq \theta \leq -0,5\pi$  tartományban periodikus határfeltételt alkalmazva. Azt tapasztaltuk, hogy a dimer rendparaméter ( $D_i$ ,



$i = 1, 2, \dots, N$ ) értéke a lánc mentén sehol sem haladta meg a  $10^{-5}$  értéket. Továbbá a DMRG algoritmus alkalmazása során a blokkok egy kötésre jutó energiája 5 tizedesjegyre megegyezett a blokkok között számolt kötési energiával.

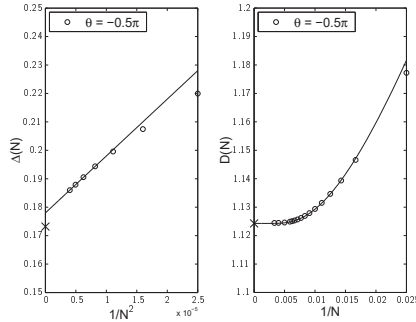
Mindezek alapján azt mondhatjuk, hogy a nyitott határfeltétel mellett számolt dimer rendparaméter ( $D$ ) értéke is legalább 4 tizedesjegyre pontosnak tekinthető ( $\delta D \leq 10^{-4}$ ).

### 4.2.2. Energiagap

A vizsgált  $\theta$  paramétertartományban szingulett az alapállapot, de nyitott határfeltétellel számolva a klasszikus antiferromágneses rendet váltó Haldane-fázisban megjelenő végspinek hatására exponenciálisan degenerálttá válik az  $S_{\text{tot}} = 1$  spinszektor, így az energiagapet az  $S_{\text{tot}} = 0$  teljes spinű és az  $S_{\text{tot}} = 2$  teljes spinű szektorok közötti energiakülönbséggel definiáljuk:

$$\Delta(N) = E_{S_{\text{tot}}=2}^{(0)}(N) - E_{S_{\text{tot}}=0}^{(0)}(N) \quad (4.2)$$

Számításainkat nyitott határfeltétel mellett végeztük, ennek megfelelően (2.12) alapján extrapoláltuk a termodinamikai határesetet. A leghosszabb láncban  $N = 500$  rácspontot vettünk fel a  $\theta = -\pi/2$  pontban végzett próbaszámításaink során.



4.4. ábra. Az energiagap ( $\Delta$ ) és a dimer rendparaméter ( $D$ )  $1/N^2$  és  $1/N$  függvényében ábrázolva a bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  spinlánc  $\theta = -\pi/2$  egzaktul megoldható pontjában. 'x' jelöli a gap és a dimerizáció egzakt értékét, a legkisebb négyzetek módszerével illesztett skálafüggvényeket pedig folytonos vonal jelzi.

A  $\Delta$  energiagap  $1/N^2$  függvényében mutatott viselkedése a 4.4. ábra első részábráján látható. A gap egzakt értékét ( $\Delta_{\text{egzakt}}^{\theta=-\pi/2} = 0,173178$ ) 'x' jelöli az ábrán, a folytonos vonal

pedig a (2.12)-ben felírt összefüggés  $250 \leq N \leq 500$  tartományra illesztett alakját mutatja ( $\Delta = 0,177(3)$ ,  $a = 2300(28)$ ).

A legkisebb négyzetek módszerét alkalmazó illesztés eredményéből látható, hogy a véges láncokon numerikusan számolt, majd extrapolált energiagap értéke mintegy 2%-kal nagyobb, mint a várt  $\Delta_{\text{egzakt}}^{\theta=-\pi/2}$  elméleti érték.

### 4.2.3. Dimer rendparaméter

A dimer rendparamétert (2.10) alapján, a szomszédos kötések közötti energiakülönbség várható értékeként definiálhatjuk. Mi is ezt tettük, nyitott határfeltétellel dolgoztunk és az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben felvett dimerizáció értékét (2.15) alapján extrapoláltuk.

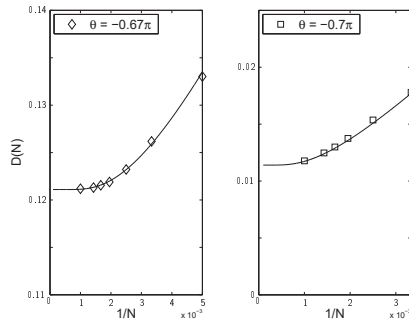
Mivel a vizsgált,  $\theta = -\pi/2$  pontban a dimer rendparaméter ( $D_{\text{egzakt}}^{\theta=\pi/2} = 1,124378$ ) és a koherencia hossz ( $\xi_{\text{egzakt}}^{\theta=\pi/2} = 21,072$ ) egzakt értéke is pontosan ismert, lehetőségünk nyílik a (2.15)-ben szereplő  $\beta$  exponens meghatározására. A legkisebb négyzetek módszerét alkalmazva  $\beta$  értéke 1-nek adódott, így a további illesztéseket, a pontosság növelése érdekében  $\beta = 1$  exponenssel számolva végeztük el. Csak az  $N > 60$  rácspontot tartalmazó láncokra illetve az alábbi eredményekhez jutunk:  $d = 5,9(1)$ ,  $\xi = 20,2(7)$ , a dimer rendparaméterre pedig  $D = 1,1244(9)$  adódott. Az illesztés (az ábrán folytonos vonal jelöli) és a számításaink eredménye a 4.4. ábra második részábráján látható. Már viszonylag rövid lánc hosszok mellett ( $N \simeq 80$ ) észrevehető a numerikus értékek konvergenciája,  $N > 200$  rácspont esetén pedig már 3 tizedesjegy pontossággal megegyezik a DMRG algoritmussal számolt  $D(N)$  dimerizáció és a  $D_{\text{egzakt}}^{\theta=\pi/2}$  egzakt számérték (az ábrán 'x' jelöli).

Ennek ellenére a korrelációs hossz hibája több mint 4% az elméleti értékhez képest, viszont a probléma szempontjából lényeges dimerizációt, ahogy a 4.4. ábrán is látható,  $|D_{\text{egzakt}}^{\theta=\pi/2} - D| = 3 \cdot 10^{-6}$  pontossággal sikerült számolnunk. Ami egyértelművé teszi, hogy a lokális mennyiségek exponenciálisan gyors konvergenciája miatt a  $D(N)$  dimer rendparaméter termodinamikai határesetbe extrapolált értéke ( $D$ ) sokkal pontosabban számolható, mint az energiagap ( $\Delta$ ).

Mindezek alapján azt a következtetést vonhatjuk le, hogy, a  $\Delta$  energiagap és a  $D$  dimerizáció különböző skálázódási tulajdonsága következtében a dimer rendparamétert érdemes vizsgálni, ha a vitatott spinnematikus fázis nyomára szeretnénk akadni  $\theta = -3\pi/4$ -nél, a ferromágneses fázishatár szomszédságában.

### 4.3. A spinnematikus fázis létének kérdése

A modell  $\theta = -\pi/2$ -nél található, egzaktul számolható pontjában végzett vizsgálódásunknak megfelelően (4.2.2. és 4.2.3. szakasz) nyitott határfeltételt alkalmazva a  $D(N)$  dimer rendparamétert számoltuk<sup>3</sup> a  $-3\pi/4 \leq \theta \leq -\pi/2$  paramétertartományban, annak érdekében, hogy eldönthessük vajon a 4.2. ábrán vázolt lehetőségek közül melyik felelhet meg a valóságnak. Számításaink eredményét a 4.5. és a 4.6 ábrán foglaltuk össze.

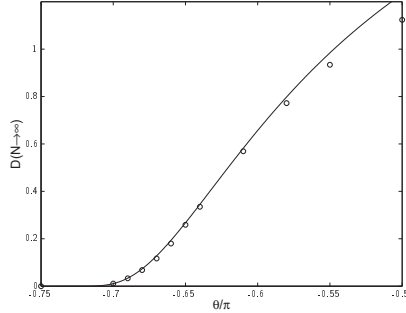


**4.5. ábra.** A dimer rendparaméter ( $D(N)$ ) változása a lánc hossz függvényében ( $100 \leq N \leq 1000$ )  $\theta = -0.67\pi$ -nél (a nem dimerizált kritikus tartomány határa [Lä, 2003] szerint) és  $\theta = 0.7\pi$ -nél. A legkisebb négyzetek módszerével illesztett skálafüggvényt folytonos vonal jelzi.

A 4.5. ábrán két különböző  $\theta$  érték mellett látható a dimer rendparaméter változása a növekvő lánc hossz reciprokának függvényében. Jól látható mindkét  $\theta$  paraméterértéknél, hogy a lánc hossz növekedésével,  $N \gtrsim 500$  esetén az adatpontok felfelé görbülnek, ami a dimer rendparaméter konvergenciájának első jele. Másfelől viszont  $\theta$  csökkenésével az inflexiós pont eltolódik a nagy lánc hosszúságok irányába. Ez pedig azt jelenti, hogy közeledve a ferromágneses fázishatárhoz egyre több rácspontból álló láncok vizsgálatát követeli meg az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetbe történő extrapoláció.

<sup>3</sup>A bilineáris-bikvadratikus lánc nemkritikus tartományában a dimer rendparaméter exponenciális végesméret-skálázódása nagyon előnyös a numerikus pontosság szempontjából, azonban a vizsgálandó fázishatárnál a korrelációs hossz divergál és ez az előny elveszik. A lehetőségeinkhez mérten legpontosabb extrapoláció érdekében a következőképpen jártunk el:  $1/N$  függvényében a  $\xi$  korrelációs hosszunk valamely  $1/N^*$ -nál a mennyiség numerikus konvergenciáját jelző inflexiós pontja van.  $\theta \rightarrow -\frac{3\pi}{4}$  esetén  $\xi \rightarrow \infty$  és ez az inflexiós pont egyre kisebb  $1/N^*$  értékeknél látható, azaz egyre hosszabb láncokkal kell számolnunk. Számításaink során csak olyan  $\theta$  értéknél extrapoláltunk, ahol teljesíteni tudtuk az  $N > N^*$  feltételt, elmentünk egészen az  $N = 1000$  rácspontot tartalmazó spinláncokig, miközben a maximálisan megtartott blokkállapotok száma a  $600 \leq M_{\max} \leq 1400$  tartományban változott.

Az extrapolált  $D$  dimer rendparamétert (2.15)-ből számoltuk, az illesztés eredményét folytonos vonal jelzi a 4.5. ábrán (a numerikus hiba jóval kisebb, mint az adatpontokat jelző szimbólumok mérete). Ezeket a  $D$  dimerizációértékeket mutatja a 4.6. ábra a  $\theta$  paraméter függvényében.



**4.6. ábra.** A dimer rendparaméter  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetbe extrapolált értéke  $\theta/\pi$  függvényében ábrázolva. A folytonos vonal a (4.3) összefüggés legkisebb négyzetek módszerével illesztett alakját mutatja.

Az első dolog, amit észreveszünk az ábrán az az, hogy  $\theta = -0,67\pi$ -nél véges ( $\approx 0,121$ ) a dimerizáció értéke (ez a 4.5. ábra első részábráján is nagyon jól látszik). Ez azért fontos, mert Läuchli és munkatársai [Lä, 2003] éppen  $\theta_c = -0,67\pi$ -t jósltak a spinnematikus fázis határaként. Azaz tovább szűkült az a  $\theta$  paramétertartomány, ahol előfordulhat ez a vitatott fázis.

Szembetűnő, hogy a  $-0,75\pi < \theta < -0,7\pi$  tartományban nincsenek adatpontjaink. Ennek az oka, hogy olyan kis  $D(N)$  dimerizációértékeket kaptunk, amelyek már összemérhetők a becsült numerikus pontosságunkkal ( $10^{-4}$ ). A  $-0,7\pi \leq \theta \leq 0,5\pi$  tartományban a dimer rendparaméter minden esetben véges értéket vett fel.

Annak ellenére, hogy  $\theta \lesssim -0,64\pi$  esetén a dimer rendparaméter gyorsan csökken, a dimerizáció ( $D(\theta)$ ) folytonossága és az  $1/N$  függvényében mutatott viselkedése mégis arra enged következtetni, hogy a dimer rendparaméter csak  $\theta = -3\pi/4$ -nél válik zérussá.

Ezt a feltételezést támasztja alá az is, hogy a dimerizáció 4.6. ábrán bemutatott viselkedése nagyon hasonlít a Berezinszkij–Kosterlitz–Thouless típusú fázisátalakuláshoz,  $\theta$  függvényében exponenciálisan lassan növekszik ("nyílik") a dimer rend-

paraméter:

$$D(\theta) = a \exp[-c(\theta - \theta_c)^{-\sigma}] \quad \theta > \theta_c \quad (4.3)$$

$$\theta_c = -3\pi/4$$

ahol  $a$  és  $c$  nem univerzális állandók,  $\sigma$  pedig egy karakterisztikus exponens, melyekre a legkisebb négyzetek módszerével elvégzett illesztés a következő számértékeket adta:  $a = 2.4(6)$ ,  $c = 0.11(5)$ ,  $\sigma = 1.3(3)$ . Az illesztés eredményét folytonos vonal jelzi a 4.6. ábrán. A dimerizáció ilyen alakban megjelenő  $\theta$  függése Sólyom és Fáth korábbi eredményeit [Fá, 1995] támasztja alá (4.2. (b) ábra).

Mindezek alapján azt mondhatjuk, hogy nem találtuk nyomát nem dimerizált fázisnak a jósolt [Lä, 2003]  $\theta \simeq -0.67\pi$  paraméterérték közvetlen környezetében, ezért véleményünk szerint a ferromágneses rendet közvetlenül a dimerizált fázis váltja fel.

## 4.4. Fázisdiagram

A DMRG algoritmust alkalmazva vizsgáltuk a bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  spinláncot a ferromágneses fázishatár szűk környezetében. Az volt a célunk, hogy megtaláljuk a Chubukov [Ch, 1990] által felvetett spinnematikus fázist vagy a Läuchli és munkatársai [Lä, 2003] által javasolt kritikus tartományt a ferromágneses és dimerizált fázisok között.

Vizsgálataink során kiemelt figyelmet fordítottunk a numerikus pontosság kérdésére, ugyanis ez kulcsfontosságú a probléma szempontjából. Éppen ezért először, összehasonlítással, részletesen vizsgáltuk a modell  $\theta = -\pi/2$  egzaktul megoldható pontját. Arra a következtetésre jutottunk, hogy a dimer rendparamétert numerikusan jóval pontosabban tudjuk számolni, mint az energiagapet, aminek a két mennyiség különböző végesméret-skálázódása az oka<sup>4</sup>.

Így, a dimerizált tartomány belsejéből indulva, egészen a ferromágneses fázis határáig, a  $\theta$  paraméter függvényében számoltuk a dimer rendparamétert, melynek viselkedéséből következtethettünk volna a keresett, köztes fázis meglétére. Számításaink szerint a dimerizáció csak  $\theta = -3\pi/4$ -nél, a ferromágneses fázis határánál tűnik el. A dimer rendparaméter értéke exponenciálisan lassan tűnik el az átalakulási pont felé haladva, pontosan

---

<sup>4</sup>Nyitott határfeltételt alkalmazva a gap hatvány függvény szerint skálázódik, míg a spinlánc közepén mért lokális dimerizációt, a lánc hossz növelésével, egyre kevésbé befolyásolják a lánc véges méretéből adódó effektusok, a dimer rendparaméter exponenciálisan skálázódik.

úgy, ahogyan az a Berezinskij–Kosterlitz–Thouless típusú átalakulásnál tapasztalható. Ez a megfigyelés teljesen összhangban van a [Fá, 1995]-beli exponenciálisan lassan nyíló energiagappel.

Végso soron azt mondhatjuk, hogy semmi nyomát nem találtuk nem dimerizált tartománynak a ferromágneses fázishatár szomszédságában  $\theta \gtrsim -0,7\pi$  esetén. A  $-0,75\pi < \theta < -0,7\pi$  paramétertartományban a numerikus számításaink pontossága nem teszi lehetővé egyértelmű állítás megfogalmazását. A dimer rendparaméter  $\theta$  és  $1/N$  függvényében mutatott viselkedése azonban mégis a keresett köztes fázis hiányára enged következtetni.

Ha mégis létezik ez a fázis, akkor annak éppen az említett  $-0,75\pi < \theta < -0,7\pi$  intervallumban kell lennie. Az viszont bizonyos, hogy e vitatott fázis, létezése esetén, a fázisdiagram sokkal keskenyebb tartományát foglalja el, mint ahogyan azt Läuchli és munkatársai gondolták (kevesebb mint  $2/3$ -ára szűkült a szóbjövő  $\theta$  paramétertartomány).

Ebből a fejezetből a bilineáris-bikvadratikus modell egzaktul is számolható  $\theta = -\pi/2$  pontjának vizsgálata, a lokális mennyiségek és az energiagapok skálázódásának összehasonlítása tekinthető önálló munkának.

## 5. fejezet

# Mott-átalakulás és dimerizáció az 1D-s $SU(n)$ Hubbard-modellben

Az átmenetifémek és ritkaföldfémek tulajdonságait vezetési elektronjaik mellett a részlegesen betöltött  $d$ , illetve  $f$  sávban elhelyezkedő elektronok határozzák meg. A vezetési sávban lévő elektronok leírására elegendően jó modellt szolgáltat a kölcsönható elektronokat kvázirészecskék gázaként kezelő Landau-elmélet, sőt bizonyos fizikai jelenségek értelmezéséhez elegendő kvázirészecskék szabad gázaként kezelni azokat, azaz az egyrészecskés képpel dolgozva is jó eredményre jutunk. Ez azonban nem mondható el a keskeny  $d$  és  $f$  sávbeli elektronokra, ahol olyan leírás szükséges, mely kellő mértékben figyelembe veszi az erős korrelációkat.

Az átmenetifémek és ritkaföldfémek leírására leginkább alkalmasnak tűnő modell kidolgozása Hubbard nevéhez fűződik. Mi is e modell egy általánosításával fogunk foglalkozni ebben a fejezetben.

A következő, 5.1. szakaszban fel fogjuk írni a vizsgált  $SU(n)$  Hubbard-modellt definiáló Hamilton-operátort, valamint rövid összefoglalót adunk a szakirodalomból megismert, a vizsgálataink szempontjából lényeges eredményekről. Az 5.2.1. szakaszban numerikus számításaink részleteire, azok pontosságára térünk ki, míg az 5.2.2. szakasz az elektron-elektron kölcsönhatás következtében végbemenő fém-szigetelő átalakulás észlelésének kérdésével foglalkozik. Az 5.3. szakaszban az  $SU(2)$  Hubbard-modellt referenciarendszerként fogjuk vizsgálni, majd vizsgálataink eredményei következnek: az 5.4. szakaszban a félig töltött esetet, míg az 5.5. szakaszban az  $1/n$  betöltöttséggel foglalkozunk. Az én munkám a numerikus számítások egy részének futtatásából, a kiszámított eredmények rendszerezéséből és az energiagapok meghatározásából állt. Eredményeink összefoglalása az 5.6.

szakaszban olvasható.

## 5.1. $SU(n)$ Hubbard modell és az ismert eredmények

Az erősen korrelált elektronrendszerek egyik érdekes tulajdonsága, hogy az elektron-elektron kölcsönhatás következtében fém-szigetelő átalakulás következhet be bennük. E Mott-átalakulás első elméleti leírását Hubbard adta meg az 1960-as években. Ez a modell egy rácson értelmezett kölcsönható elektronrendszert ír le. Feltételezte, hogy az elektronállapotok nem degenerált sávot alkotnak,<sup>1</sup> továbbá feltételezte, hogy a Coulomb-kölcsönhatás lokális és az alábbi formában írta fel az  $SU(2)$  Hubbard-modell Hamilton-operátorát:

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (5.1)$$

Az  $SU(2)$  Hubbard-modell természetes általánosításaként adódik az  $SU(n)$  Hubbard-modell, melyben a spin indexek nem csak kettő ( $\uparrow, \downarrow$ ), hanem  $n$  különböző értéket vehetnek fel<sup>2</sup>. Ha csak elsőszomszéd csatolást veszünk figyelembe az átfedési integrálban és  $c_{i\sigma}^{\dagger}$  jelöli az  $i$ -edik rácsponton  $\sigma$  spinű elektront keltő, illetve eltüntető operátorokat, valamint  $n_{i\sigma}$  a részecskeszám operátor, akkor az egydimenziós  $SU(n)$  Hubbard-modell Hamilton-operátorát a következő alakban írhatjuk:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=1}^n (c_{i+1,\sigma}^{\dagger} + c_{i,\sigma}^{\dagger}) c_{i,\sigma} + U \sum_i \left( \sum_{\sigma=1}^n n_{i,\sigma} \right)^2, \quad (5.2)$$

ahol  $N$  jelöli az egydimenziós lánc rácspontjainak számát,  $U$  az egy rácsponton ható Coulomb-taszítás erőssége,  $t$  pedig az átfedési integrál.

Az  $SU(2)$  Hubbard-modell (5.2)-ben felírt  $SU(n)$  általánosítása jól modellezi az olyan erősen korrelált elektronrendszerek viselkedését, melyekben fontos szerepet játszanak az  $f$  és  $d$  elektronok pályaszabadsági fokai. Éppen ezért az  $SU(n)$  Hubbard-modell a szilárdtestfizika intenzíven kutatott [Ma, 1989, As, 1999, As, 2004, Ho, 2004, As, 2005, Sz, 2005, Sz, 2006] területei közé tartozik. Doktori munkám második lépéseként ebbe a kutatásba kapcsolódtam be én magam is.

Az  $SU(n)$  Hubbard-modell vizsgálata során mi elhagytuk az (5.2)-ben felírt Hamilton-

<sup>1</sup> Azaz a Pauli-elv értelmében egyszerre maximum két elektron tartózkodhat egy rácsponton.

<sup>2</sup> Ez a spin index úgy fogható fel, mintha a spin és a pálya szabadsági fokokat együttesen vennénk figyelembe.



operátor utolsó összegzéséből az  $n_{i,\sigma}n_{i,\sigma}$  tagokat, mivel ezek csak egy konstans energia-eltolódást jelentenek a kémiai potenciálban. Az így kapott

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=1}^n (c_{i+1,\sigma}^\dagger + c_{i+,\sigma}^\dagger) c_{i,\sigma} + U \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{\sigma,\sigma'=1 \\ \sigma \neq \sigma'}}^n n_{i,\sigma} n_{i,\sigma'}, \quad (5.3)$$

Hamilton-operátorban viszont szembeűnőbb, hogy nem lehet két azonos spinű részecske egy rácsponton, így a Coulomb-taszítás is csak különböző spinindexű részecskék között lép fel.

Az  $SU(2)$  Hubbard-modell egzaktul megoldható. A Bethe-ansatz egyenletek megoldásából tudjuk, hogy félíg töltött esetben  $U_c = 0$ -nál egy Mott-átalakulás zajlik le. Az  $SU(n)$  Hubbard-modellről,  $n > 2$  esetén, azonban nem ismert az egzakt megoldása, nem tudunk hasonló állítást megfogalmazni.

Általános betöltöttség mellett a vizsgált egydimenziós  $SU(n)$  Hubbard-modell úgy viselkedik, mint egy  $n$ -komponensű Luttinger-folyadék. Egy szimmetrikus (töltés) és  $n - 1$  antiszimmetrikus (spin) lágy bozon módus jellemzi. Speciális betöltöttség esetén azonban megnövekedhet az umklapp folyamatok jelentősége. Elrontva a spin-töltés szeparációt, az umklapp folyamatok csatolhatják a spin és a töltés szabadsági fokokat, a spin- vagy töltésgerjesztések spektrumában gap nyíllhat. Munkám során a félíg töltött és az  $1/n$  betöltöttségű eseteket vizsgáltuk.

Marston és Affleck megmutatta [Ma, 1989], hogy az egydimenziós félíg töltött  $SU(n)$  Hubbard-modellben, nagy  $n$  határesetben, a spin- és a töltésmódusok, melyek szeparáltak az  $SU(2)$  Hubbard-modellben, csatoltttá válnak és mindkét gerjesztés spektruma gapessé válik. Azt is megmutatták, hogy a rendszer spontán dimerizálódik páros  $n$  értékek esetén.

Szirmai és Sóllyom az umklapp folyamatok szerepét vizsgálta a félíg töltött  $SU(n)$  Hubbard-modellben az analitikus multiplikatív renormalizáció-csoport eljárást alkalmazva [Sz, 2005] és hasonló eredményre jutottak. Megmutatták, hogy az umklapp folyamatok bármely  $n > 2$  esetben csatolják a töltés- és spinmódusokat és a gerjesztési spektrum a Coulomb-taszítás ( $U$ ) értékétől függetlenül gapes. A dimerizáció kérdését viszont nem vizsgálták.

Assaraf és munkatársai az  $1/n$  betöltöttséget tanulmányozták [As, 1999], mind analitikusan (a modell bozonizált változatát), mind numerikusan (kvantum Monte-Carlo-szimulációt alkalmazva). Ennél a speciális betöltöttségnél a részecskék és a rácspontok száma éppen megegyezik. Megmutatták, hogy a spin és a töltés szabadsági fokok szétcsa-

tolódnak és csak a töltésgerjesztések spektrumában nyílik gap, a spinmódus lágy marad. Továbbá, az analitikus számítások eredményeiből, arra a következtetésre jutottak, hogy  $n > 2$  esetén, az  $SU(2)$  esettel ellentétben ( $U_c = 0$ ), a töltésgap egy véges, pozitív  $U_c$  értéknél nyílik, ez alatt ( $U < U_c$ ) a rendszer fémes viselkedést mutat.

Vizsgálataink gyakorlatilag a fenti munkák folytatásának tekinthetők. Az egydimenziós  $SU(n)$  Hubbard-modellt vizsgáltuk numerikusan, a DMRG algoritmust alkalmazva. Kiemelt figyelmet fordítottunk a numerikus pontosság kérdésére, a termodinamikai határesetet, számítási lehetőségeinket figyelembe véve, a lehető leghosszabb láncokkal számolva extrapoláltuk. Vizsgálatainkat  $1/2$  és  $1/n$  betöltöttség mellett végezzük  $n=2, 3, 4$  és  $5$  értékekre. Két kérdésre kerestük a választ:

1. Félíg töltött esetben az alapállapot dimerizációjának kérdését vizsgáltuk. Marston és Affleck [Ma, 1989] csak páros  $n$  értékek esetén jóslott spontán dimerizációt, mi azonban megmutattuk, hogy páratlan  $n$  esetén is dimerizálódik az alapállapot, azaz a félíg töltött  $SU(n)$  Hubbard-modell ugyan úgy viselkedik páratlan  $n$ -ekre, mint párosakra.
2.  $1/n$  betöltöttség esetén a Mott-átalakulás helyét kerestük, a kritikus  $U_c$  értéket próbáltuk pontosítani. Assaraf és munkatársai a gapeket vizsgálva következtettek véges  $U_c$  értékre [As, 1999], mi a rácspont-entrópiákat is vizsgáltuk, melyek viselkedése sokszor, különösen Berezinskij–Kosterlitz–Thouless típusú fázis átalakulás esetén, megbízhatóbban jelzi a fázishatárokat. Megmutattuk, hogy a kritikus  $U_c$  sokkal kisebb az irodalomban szereplő értéknél, számításaink szerint, az  $n = 2$  esethez hasonlóan,  $U_c = 0$ .

## 5.2. A numerikus módszer paraméterezése, pontossága, indikátormennyiségek

Vizsgálataink során véges láncokkal dolgoztunk, nyitott határfeltétel mellett, a DMRG algoritmus alkalmazásával. Számításaink során dinamikus blokkállapot-kiválasztást alkalmaztunk, az egy lépésben fellépő kvantuminformáció-vesztéset  $\chi_{\max} = 10^{-5}$ -ben maximáltuk és megköveteltük, hogy az eljárás során ne csökkenjen a blokkállapotok száma  $M_{\min} = 256$  alá. A rendszer minden sajátállapotot külön határoztuk meg, az eljárás 4 sweep elvégzése után konvergált.

A következő részben számítási kapacitásunk korlátairól, eredményeink pontosságáról lesz szó, majd sorra veszem a probléma szempontjából releváns mennyiségeket, melyek meghatározásából következtettünk az  $SU(n)$  Hubbard-modell tulajdonságaira.

### 5.2.1. Numerikus pontosság

A dinamikus blokkállapot-kiválasztás alkalmazása során úgy választjuk meg a vágási eljárás során megtartott blokkállapotok számát, hogy a (2.8)-ban felírt egyenlőtlenség teljesüljön, azaz az egy lépésben bekövetkező kvantuminformáció-vesztésre írunk elő felső korlátot. Ilyen módon persze nem növelhetjük a pontosságunkat a végtelenségig, hiszen a pontosabb számolásnak az az ára, hogy több blokkállapotot kell megtartanunk és kezelnünk. A blokkállapotok maximális számát pedig a számítógépes apparátusunk korlátozza.

Az 5.1. táblázat éppen azt szemlélteti, hogy növekvő  $n$  értékek mellett maximálisan mennyi blokkállapotot tudtunk kezelni. Ez persze a Hubbard-modell fermionláncainak hosszára is felső korlátot jelent. A probléma kis  $U$  értékeknél ( $U < 1$ ), a fázishatár közelében, ahol nagy a rendszer koherenciahossza, jelentette a legnagyobb korlátozást a láncosszra nézve (a szuperblokk Hamilton-operátor legnagyobb mérete  $3 \cdot 10^6$  volt számításaink során). Az 5.1. táblázat a kis  $U$  mellett elérhető legnagyobb láncosszakokat is tartalmazza.

**5.1. táblázat.** A lépésenkénti legfeljebb  $\chi_{\max} = 10^{-5}$  kvantuminformáció-vesztesség ( $U < 1$  és  $M_{\min} = 256$ ) mellett kezelhető blokkállapotok maximális száma ( $M_{\max}$ ) és az elérhető legnagyobb rendszer méret ( $N_{\max}$ ) az  $SU(2)$ ,  $SU(3)$ ,  $SU(4)$  és  $SU(5)$  Hubbard-modellek esetében.

n	Blokkállapotok $M_{\max}$ maximális száma	$N_{\max}$ maximális rendszerméret
2	2500	
3	1500	$\simeq 90$
4	800	$\simeq 30$
5	256	$\simeq 20$

A fenti feltételek mellett elvégzett számításaink során az abszolút hibánk nagyságrendileg  $10^{-4}$  volt. Az 5.1. táblázatban feltüntetett maximális értékeknél hosszabb láncokkal dolgozva<sup>3</sup> jóval kisebb pontosságot tudnánk csak elérni, ez pedig erősen kérdésessé tenné az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetbe történő extrapoláció pontosságát.

<sup>3</sup>A nagyobb rendszerméret elérése érdekében a pontosságból kellene engedni, tehát az algoritmus egy lépésében megengedett  $\chi_{\max}$  kvantuminformáció-vesztesség értékét kellene megnövelni.

### 5.2.2. Fázishatárok

A fázisátalakulási pontot legegyszerűbben az energiagapok vizsgálatával találhatjuk meg. A spingap az egy részecske spinjének megváltoztatásához szükséges többlet energiát jelenti, azaz

$$\Delta_s = E_{+1, -1}(N) - E_0(N), \quad (5.4)$$

a töltésgap pedig pedig a részecskeszám megváltoztatásával járó energianövekményként írhatjuk fel:

$$\Delta_c = E_{+1}(N) + E_{-1}(N) - 2E_0(N). \quad (5.5)$$

A fenti jelölésrendszerben  $E_{+1}(N)$  az alapállapotú energiát jelenti abban az esetben, ha a kiinduláshoz képest egy tetszőleges spinű részecskét adtunk a rendszerhez, értelemszerűen  $E_{-1}(N)$  a Hamilton-operátor legalacsonyabban fekvő energia-sajátértéke abban az esetben, ha a kiindulási konfigurációból elvettünk egy részecskét, végezetül  $E_{+1, -1}(N)$  jelöli a legalacsonyabban fekvő energiaszintet abban az esetben, ha elveszünk a rendszerből egy  $\sigma$  spinű részecskét és a helyére egy  $\sigma'$  ( $\sigma \neq \sigma'$ ) spinű részecskét teszünk ( $E_0$  a kiindulási rendszer alapállapotú energiája).

Látni fogjuk, hogy nagyon nehéz feladat a gapok nyílását numerikusan vizsgálni, éppen ezért a 3. fejezetben megismert (3.1) egyrácspon- és (3.9) kétrácspon-entrópiákat, valamint a kétrácspon-entrópia (3.10) dimerizációját is figyelemmel kísértünk.

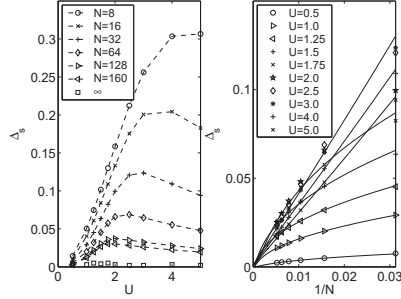
A véges láncokon meghatározott  $\Delta_s$  és  $\Delta_c$  energiagapok,  $s_i$  és  $s_{i,i+1}$  rácspon-entrópiák és  $D_s$  dimer rendparaméter  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben felvett értékeit a 2.4. szakaszban felírt (2.14), (2.13), és (2.15) skálafüggvények szerint extrapoláltuk.

## 5.3. Az $SU(2)$ modell mint referencia rendszer

Vizsgálataink során ismételten kiemelt fontosságú a numerikus számítások pontossága, ezért először az  $SU(2)$  Hubbard-modellt vizsgáltuk meg, hogy össze tudjuk hasonlítani eredményeinket az ismert elméleti eredményekkel.

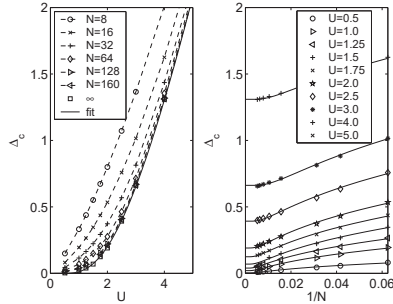
A DMRG algoritmussal számolt energia sajátértékek és a Bethe-ansatz egyenletek megoldásaként kapott energiák minden esetben legalább 5 tizedesjegyre megegyeztek:  $|E^{\text{DMRG}} - E^{\text{Bethe-ansatz}}| \leq 10^{-5}$ . A  $\Delta_s$  spin- és  $\Delta_c$  töltésgapok  $U$  rácspon-entrópiák Coulomb-kölcsönhatás függése az 5.1. és az 5.2. ábrán látható.

Az elméletileg eltűnő spingap látszólag nem monoton függvénye  $U$ -nak, növekvő lánc-hosszok ( $N$ ) mellett csökkenő  $U$  értékeknél maximuma van. Ez azonban csak végesméret-



**5.1. ábra.** A  $\Delta_s$  spingap  $U$  egy rácsponton ható Coulomb-kölcsönhatás függése és végesmérték-skálázódása a félig töltött SU(2) Hubbard-modell esetén. Az első részásra szaggatott vonalai segédvonalak, az adatpontokat kötik össze, míg a végesmérték-extrapoláció eredményét ismét folytonos vonallal jelzi az ábra második részábráján.

effektus, az  $N \rightarrow \infty$  határesetben a spingap  $\Delta_s = 0.0006(1)$  értéket vesz fel nagy és kis  $U$  értékek mellett, de a köztes tartományban sem haladja meg a  $10^{-3}$  értéket ( $\Delta_s < 10^{-3}$ ), azaz a spingapet hozzávetőleg  $5 \cdot 10^{-4}$ -es hibával tudjuk számolni.

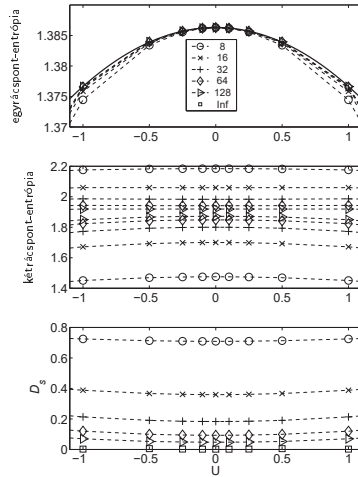


**5.2. ábra.** A  $\Delta_c$  töltésgap  $U$  egy rácsponton ható Coulomb-kölcsönhatás függése és végesmérték-skálázódása a félig töltött SU(2) Hubbard-modell esetén (A 5.1. ábra megfelelője).

A töltésgap ezzel szemben az  $U$  monoton növekvő függvénye, minden  $U$  mellett végesek az extrapolált gapértékek az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben, a gap exponenciálisan lassan nyílik

$$\Delta(U) = a \cdot e^{-c(U-U_c)^{-\sigma}} \quad (5.6)$$

ami a Berezinszkij-Kosterlitz-Thouless típusú fázisátalakulás jellemzője.<sup>4</sup> A legkisebb négyzetek módszerével végzett illesztés  $U_c = 0,024$  ( $\kappa = 5 \cdot 10^{-4}$ ) kritikus értéket ad eredményül  $a = 100,513$ , valamint  $c = 8,931$  állandók és  $\sigma = 0,517$  exponens mellett.  $\kappa$ -val a négyzetes eltérést jelöltük. Ha  $\sigma$  értékét  $\sigma = 1/2$ -nek választjuk és újra elvégezzük az illesztést, a mennyiségek hibája akkor sem csökken,  $a$  és  $c$  értéke gyakorlatilag változatlan marad, a kritikus Coulomb-csatolás értékére pedig  $U_c = 0,075$  ( $\kappa = 8 \cdot 10^{-4}$ ) adódik. Figyelembe véve, hogy elméletileg  $U_c = 0$ , azt kell mondanunk, hogy az exponenciálisan lassan nyíló töltésgap esetében a kritikus  $U_c$ -t csak  $10^{-2}$  pontossággal tudtuk meghatározni.



**5.3. ábra.** A láncok közepén,  $i = N/2$ -nél meghatározott egyrácpont- és kétrácpont-entropia, valamint a kétrácpont-entropia dimerizációja az  $U$  rácsponton belüli Coulomb-kölcsönhatás függvényében ábrázolva a félig töltött  $SU(2)$  Hubbard-modell esetén ( $N = 8, 16, 32, 64, 128$ ). A lánc két középső, szomszédos kötéseinek kétrácpont-entropiáját ábrázoltuk, azaz a második részabrában az  $i = N/2$  és az  $i = N/2 + 1$  entropia görbepárok vannak feltüntetve. A kétrácpont-entropia harmadik részabrában ábrázolt dimerizációja éppen az  $i = N/2$  és  $i = N/2 + 1$  görbepárok közötti különbséget mutatja  $U$  függvényében. A szaggatott vonalak most is csak segédvonalak, az adatpontokat kötik össze, míg az (5.8) parabolikus illesztés eredményét folytonos vonal jelöli.

Az 5.3. ábrán az  $(s_{N/2})$  egy- és  $(s_{N/2, N/2+1})$  kétrácpont-entropia, illetve a  $(D_s)$  di-

<sup>4</sup>Az  $SU(2)$  Hubbard-modell vizsgálatával egyetlen célunk van: megbecsülni numerikus számításaink pontosságát. Ez az oka annak, hogy a Bethe-ansatz egyenletek megoldásából ismert  $\Delta(U) = \sqrt{U} \cdot e^{-1/U}$  összefüggés helyett az általános, Assaraf és munkatársai [As, 2004] által  $n > 2$  esetén alkalmazott (5.6) formulát illesztjük az adatpontjainkra.

mer rendparaméter  $U$  függése látható (az  $N \rightarrow \infty$  határesetbe történő extrapolációhoz felhasznált leghosszabb láncunk  $N = 128$  rácspontból állt).

Azonnal látszik, hogy sem az egyrácspont-, sem a kétrácspont-entrópia függvény viselkedésében nem fedezhető fel semmiféle anomália és mindkét entrópiafüggvény az elméleti,  $U = 0$ , fázisátalakulási pontban veszi fel a maximumát. Azonban többet is mondhatunk: S.-J. Gu és munkatársai [Gu, 2004] a Bethe-ansatz egyenletek megoldásából kiindulva analitikus összefüggést adtak az egyrácspont-entrópiára

$$s_{N/2} = \ln 4 - \frac{1}{2} \left[ \frac{7\zeta(3) \cdot U}{2\pi^3} \right]^2 + \dots, \quad (5.7)$$

ahol  $\zeta$  a Riemann féle zeta függvény ( $\zeta(n) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-n}$ ),  $U$  pedig az egy rácsponton ható Coulomb-taszítás. Ennek megfelelően az

$$s_{N/2}(U) = s_0 - BU^2 \quad (5.8)$$

összefüggést illesztettük a DMRG algoritmussal számolt egyrácspont-entrópia értékekre:  $s_0 = 1.386(1)$ ,  $B = 0.00929(1)$ . Az illesztés eredményét folytonos vonal jelzi az 5.3. ábra első részábráján. Látható, hogy nagyon jó az egyezés az elméleti  $s_0^{\text{egzak}} = \ln 4 = 1.38629436111989$  és  $B^{\text{egzak}} = \frac{1}{2} \cdot \left[ \frac{7\zeta(3)}{2\pi^3} \right]^2 = 0.0092057$  értékekkel. Azaz a numerikusan számolt rácspont-entrópia függvények az elméletileg várt viselkedést mutatják.

Az is látható az 5.3. ábra második részábráján, hogy a kétrácspont-entrópia határozottan különböző értéket vesz fel a szomszédos kötéseken (alsó és felső ágak –  $s_{N/2, N/2+1}$  és  $s_{N/2+1, N/2+2}$ ) minden véges  $N$  hosszúságú lánc esetében. Ennek ellenére termodinamikai határesetben a dimer rendparaméter minden  $U$  mellett a  $D_s = 0.0005(1)$  értékhez tart.

Tudjuk, hogy az  $SU(2)$  Hubbard-modell alapállapota nem dimerizált, így azt mondhatjuk, hogy a további numerikus számolás során az  $5 \cdot 10^{-4}$ -nél kisebb dimer rend értéket nullának kell tekintenünk. Ahogyan azt már korábban láttuk ez az állítás az energiagapekre is igaz ( $\Delta_s, \Delta_c \leq 5 \cdot 10^{-4} \Rightarrow \Delta_s, \Delta_c = 0$ ).

## 5.4. Félíg töltött $SU(n)$ modellek

Renormálációs csoport-módszerrel végzett számítások [Ma, 1989, Sz, 2005] megmutatták, hogy félíg töltött esetben, amikor egy  $N$  rácspontot tartalmazó rendszerben bármely  $\sigma$  spinű részecskéből  $N_\sigma = 1/2 \cdot N$  darab van, a töltésmódus minden esetben gapes.  $n > 2$  esetén a

spin- és töltésmódusok csatolttá válnak, a spinmódusokban is gap nyílik. Marston és Affleck [Ma, 1989] még azt is megmutatta, hogy páros  $n$  értékekre az alapállapot a kötésekre centrált töltéssűrűség-hullám állapot, a rendszer spontán dimerizálódik.

A fejezet legfontosabb eredménye az, hogy a DMRG algoritmust alkalmazva nemcsak páros, hanem páratlan  $n$ -ek esetében is meg tudtuk határozni a dimerizáció értékét, megerősítve és kiterjesztve ezzel Marston és Affleck eredményeit.

A további szakaszokban a következő logikai sorrendet fogjuk követni: először megvizsgáljuk az energiagapeket, a spin- és a töltésgapok nyílását, majd a rácspont-entrópia függvényekben próbálunk fázishatárra utaló anomális viselkedést találni, végül a kétrácspont-entrópia dimerizációját fogjuk megvizsgálni, arra a kérdésre keresve a választ, hogy dimerizált-e a rendszer alapállapota.

### 5.4.1. Páros $n$

A legkisebb páros  $n > 2$  érték, ami egyben az egyetlen is, amire számolni tudtunk az  $n = 4$ .

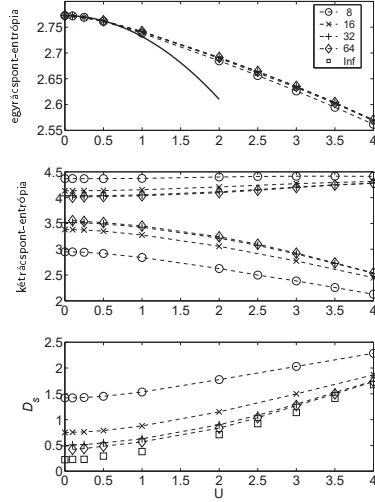
Az előző, 5.3. szakaszban megmutattuk, hogy az  $SU(2)$  Hubbard-modell esetén, ahol a számítási kapacitásunk relatíve hosszú láncok vizsgálatát is lehetővé tette, sem tudjuk  $5 \cdot 10^{-4}$ -nél pontosabban meghatározni az energiagapeket. Az 5.1. táblázatból azt is kiolvashatjuk, hogy  $U < 1$  csatolási állandó esetén  $N = 32$  rácspontból áll az a lánc, amit még numerikusan kezelni tudunk, ez pedig nem elégséges az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határeset elfogadható, a fenti pontossággal végzett extrapolációjához.

Éppen ezért csak  $U$  egy nagy értékénél,  $U = 4$ -nél, ahol a  $\chi_{\max} = 10^{-5}$  lépésenkénti maximális kvantuminformáció-veszteség mellett az  $N = 64$  rácspontot tartalmazó lánc még éppen kezelhető, számoltuk a spin- és töltésgapokat. Termodinamikai határesetben az alábbi értékek adódtak a gapokra:  $\Delta_s = 0.26(2)$  és  $\Delta_c = 0.69(4)$ . Ezek kétségtelenül egy kicsivel a [As, 2004]-ban közölt értékek fölött vannak, azt mégis nyilvánvalóan sikerült megmutatnunk, hogy a várakozásunknak megfelelően, mind a spin-, mind a töltésgap véges.

A félig töltött Hubbard-modellek esetében az alapállapot dimerizációjának vizsgálata volt az elsődleges célunk, ennek megfelelően kiszámítottuk az egyrácspont- és kétrácspont-entrópiának és a kétrácspont-entrópia dimerizációjának  $U$  függését is. Eredményeinket a 5.4. ábra szemlélteti.

Az egyrácspont-entrópia nem mutatott dimerizációt, viszont a kétrácspont-entrópia értékek jól láthatóan különböznek a szomszédos kötéseken minden megvizsgált, véges  $N$  lánc-hossz mellett, ennek megfelelően a dimer rendparaméter is véges. Sajnos  $U < 1$  esetén, számítási kapacitásunk gapok kapcsán felmerült korlátai a rácspont-entrópiák számításá-





**5.4. ábra.** A láncok közepén,  $i = N/2$ -nél meghatározott egyrácpont- és kétrácpont-entropia, valamint a kétrácpont-entropia dimerizációja az  $U$  rácponton belüli Coulomb-kölcsönhatás függvényében ábrázolva a félig töltött  $SU(4)$  Hubbard-modell esetében (az 5.3. ábra megfelelője).

nak, így a dimer rendparaméter számításának pontosságát is korlátozzák. Ez az oka annak, hogy nem tudtuk elfogadható pontossággal meghatározni azt a kritikus  $U_c$  értéket, ahol dimerizálttá válik a rendszer alapállapota és végessé válnak az energiagapok.

Feltétlenül meg kell említeni, hogy a kétrácpont-entropia 5.4. ábrán bemutatott dimerizációja kissé túl van becslve a leghosszabb  $N = 64$  rácpontot tartalmazó láncunk esetén. Ez a lépésenkénti kvantuminformáció-veszteség csökkentésére tett próbálkozás során vált világossá, kisebb  $\chi_{\max}$  érték mellett kisebb  $D_s$  dimerizációt számoltunk. Ezt semmiképpen sem szabad figyelmen kívül hagyni az 5.4. ábra értelmezésekor.

Ahhoz persze kétség sem férhet, hogy a dimer rendparaméter véges  $U > 1$  esetén. Az 5.4. ábra legelső részábrájáról még azt is leolvashatjuk, hogy nagy  $N$  határesetben a dimer rendparaméter exponenciálisan lassan növekszik  $U$  függvényében, ez a viselkedés pedig nagyon hasonlít a Berezinskij-Kosterlitz-Thouless típusú fázisátalakuláshoz tapasztalhatóhoz. Már szóba került, hogy a kritikus  $U_c$  értéket nem tudjuk meghatározni, de a rácpont-entropia függvények viselkedéséből következtethetünk.

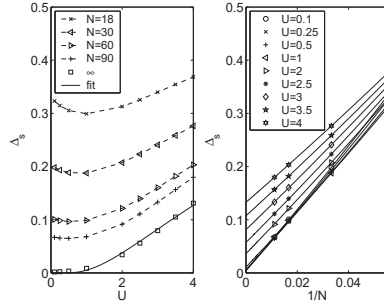
Mind az egyrácpont-, mind a kétrácpont-entropia folytonos, sima függvénye  $U$ -nak,

mindkét entrópia függvény  $U = 0$ -ban veszi fel maximumát. Az  $SU(2)$  modellhez hasonlóan  $n = 4$  esetén is jól illeszkedik az  $s_0 + BU^2$  parabola az egyrácspont-entrópia adatpontjaira ( $s_0 = 2,772(4)$ ,  $B = 0,0404(3)$ ). Összehasonlításl  $s_0^{\text{egzak}} = \ln 16 = 2,77258872223978$ . Mindez az  $U_c = 0$  esetet valószínűsíti.

A fenti eredmények teljes egyezést mutatnak Marston és Affleck eredményeivel [Ma, 1989].

### 5.4.2. Páratlan $n$

Ebben a szakaszban az  $SU(n)$  Hubbard-modellek páratlan  $n$  értékek mellett tanúsított viselkedését vizsgáljuk félig töltött esetben, összehasonlítva a páros és a páratlan  $n$ -ek esetén tapasztaltakat. Vizsgálatainkat kezdjük a legpontosabban számolható  $SU(3)$  modellel!

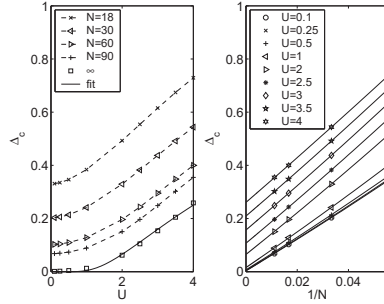


**5.5. ábra.** A  $\Delta_s$  spingap  $U$  egy rácsponton ható Coulomb-kölcsönhatás függése és végesméret-skálázódása a félig töltött  $SU(3)$  Hubbard-modell esetén (az 5.1. ábra megfelelője).

Az 5.5. ábra első (bal) részábráján a  $\Delta_s$  spingap  $U$  függése látható különböző véges  $N$  lánc hosszok mellett. A jobb oldali részábra a spingap skálázódását mutatja  $1/N$  függvényében ( $\Delta_s(\frac{1}{N})$ ). Az  $N \rightarrow \infty$  extrapolációt (2.13) alapján végeztük el, az extrapoláció eredményét az 5.2. táblázat 2. oszlopában olvashatjuk, az ábrán pedig folytonos vonal jelöli. Az így kapott extrapolált spingap értékeket üres négyzetek jelölik az 5.5. ábra bal oldali részábráján. Az  $U$  függvényében exponenciálisan lassan nyíló  $\Delta_s$  gap értékekre a legkisebb négyzetek módszerét alkalmazva illesztettük a négyparaméteres (5.6) görbét:  $a = 1,089$ ,  $c = 4,9256$  és  $\sigma = 0,607$  mellett  $U_c = 0,054$  ( $\kappa = 8 \cdot 10^{-7}$ ) értéket kaptunk a kritikus Coulomb-taszításra (az 5.5. ábra baloldali részábráján folytonos vonal jelzi az illesztés eredményét). Rögzített  $\sigma = 1/2$  mellett megismételve az illesztést, ahogyan Assaraf és munkatársai [As, 2004] tették  $U_c = 0,098$  ( $\kappa = 2 \cdot 10^{-6}$ ) adódik.

**5.2. táblázat.** Az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetbe extrapolált  $\Delta_s$  spin- és  $\Delta_c$  töltésgap értékek a félig töltött  $SU(3)$  Hubbard-modell esetében.

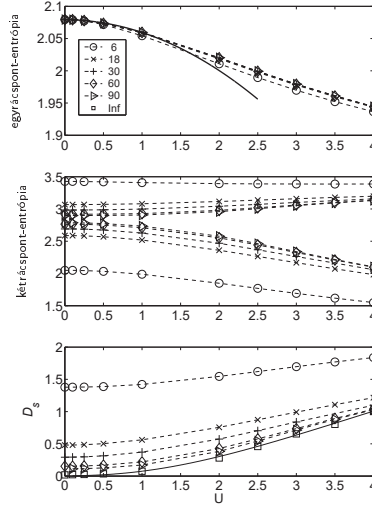
$U$	$\Delta_s$	$\Delta_c$
0,1	0,0017(4)	0,0010(5)
0,25	0,0021(4)	0,0016(4)
0,5	0,0035(4)	0,0040(4)
1,0	0,0086(3)	0,0128(3)
2,0	0,0339(3)	0,0618(2)
2,5	0,0559(2)	0,1047(1)
3,0	0,0794(2)	0,1537(2)
3,5	0,1057(1)	0,2047(1)
4,0	0,1318(1)	0,2586(1)



**5.6. ábra.** A  $\Delta_c$  charge gap  $U$  egy rácsponton ható Coulomb-kölcsönhatás függése és végesméret-skálázódása a félig töltött  $SU(3)$  Hubbard-modell esetén (az 5.2. ábra megfelelője).

Az 5.6. ábra az előző, 5.5. ábrának megfelelően a  $\Delta_c$  töltésgapet mutatja. A végesméret-skálázást ismételtén a (2.13) összefüggést felhasználva végeztük el. A  $\Delta_c$  töltésgap különböző  $U$ -k mellett termodinamikai határesetben felvett értékét az 5.2. táblázat 4. oszlopában olvashatjuk. A töltésgap  $U$  függésére pedig az (5.6) formulát illetve,  $a = 1,0855$ ,  $c = 5,0492$  és  $\sigma = 0,906$  mellett az  $U_c = 0,0913$  ( $\kappa = 5 \cdot 10^{-7}$ ) eredményt kapjuk. Az ábrán folytonos vonal jelzi az illesztett görbét. Rögzített  $\sigma = 1/2$  mellett megismételve az illesztést  $U_c = 0,099$  ( $\kappa = 2 \cdot 10^{-5}$ ) adódik.

Az 5.7. ábra a rácspont-entrópiákat és a két rácspont-entrópia dimerizációját mutatja  $U$  függvényében különböző, véges  $N$  lánc hosszok mellett. Az egy rácspont-entrópia  $U = 0$ -ban maximális és az  $SU(2)$  modellhez hasonlóan jól illeszthető az (5.8) parabola az adatpontokra:  $s_0 = 2,079(3)$ ,  $B = 0,0197(1)$ . Összehasonlításképpen:  $s_0^{\text{egzak}} = \ln 8 = 2,07944154167984$ . Sem az egy rácspont-, sem a két rácspont-entrópia függvény viselkedése-



**5.7. ábra.** A láncok közepén,  $i = N/2$ -nél meghatározott egyrácpont- és kétrácpont-entrópia, valamint a kétrácpont-entrópia dimerizációja az  $U$  egy rácsponton ható Coulomb-kölcsönhatás függvényében ábrázolva a félig töltött  $SU(3)$  Hubbard-modell esetében (a 5.3. ábra megfelelője).

ben nem fedezhető fel semmiféle anomália  $U > 0$  esetén.

A dimerizációt ismételten csak a kétrácpont-dimerizáció jelzi. Termodinamikai határesetben minden  $U$  érték mellett véges dimerizációt kaptunk. Az 5.7. ábrán az is jól látszik, hogy az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben a  $D_s$  dimer rendparaméter exponenciálisan lassan növekszik  $U$  függvényében, így remekül illeszkedik az adatpontokra a Berezinszkij–Kosterlitz–Thouless típusú fázisátalakulás (5.6)-ban felírt alakja.  $\sigma$ -t  $1/2$ -nek tartva a legkisebb négyzetek módszerével elvégzett illesztés eredménye:  $a = 18,324$ ,  $c = 5,827$  és  $U_c = 0,013$  ( $\kappa = 5 \cdot 10^{-7}$ ).

Számítási kapacitásunk már részletezett korlátai miatt az  $SU(5)$  Hubbard-modell esetében csak  $N = 20$  rácspont hosszúságú láncokat tudtunk vizsgálni. Ilyen rövid láncokkal számolva semmit nem tudunk mondani a gapekről, de az entrópiafüggvények viselkedése is csak tendenciákat mutat:

1. Az egyrácpont- és kétrácpont-entrópiák sima, folytonos függvényei az  $U$  lokális Coulomb-csatolásnak,  $U = 0$ -ban veszik fel maximális értéküket.

2. A kétrácpont-entrópia dimerizációja véges, a rendszer dimerizált, akárcsak az  $SU(3)$  és  $SU(4)$  Hubbard-modellek esetében.

Mindezen eredmények alapján azt a következtetést vonhatjuk le, hogy a félig töltött Hubbard-modell páratlan  $n$  értékek esetén<sup>5</sup> ugyanolyan viselkedést mutat, mint amelyet Marston és Affleck [Ma, 1989] jósolt páros  $n$ -ek esetén.

## 5.5. $1/n$ betöltöttségű $SU(n)$ modellek

A másik érdekes betöltöttség, amit vizsgáltunk, az az  $1/n$  betöltöttség, mikor pontosan annyi részecskénk van a rendszerben, mint ahány rácspontunk van. Ez sok tekintetben a félig töltött  $SU(2)$  Hubbard-modell megfelelője.

Assaraf és munkatársai 1999-ben közzétett [As, 1999] analitikus és kvantum Monte-Carlo-módszerrel kapott eredményei szerint  $1/n$ -es betöltöttség mellett a  $\Delta_s$  spingap  $U$  tetszőleges értéke mellett eltűnik, míg a  $\Delta_c$  töltésgap exponenciálisan lassan nyílik egy véges pozitív  $U_c$  értéknél, ez alatt ( $U < U_c$ ) a rendszer fémes viselkedést mutat.

Ezeket a vizsgálatokat relatíve rövid ( $N \leq 30$ ) láncokon végezték el, ebben a szakaszban, a DMRG algoritmus segítségével jóval nagyobb rendszerméreteket is vizsgáltunk és reményeink szerint sikerült pontosítanunk a kritikus  $U_c$  értéket. Vizsgálatainkat az  $SU(3)$ ,  $SU(4)$  és  $SU(5)$  Hubbard-modelleken végeztük. Ismételtén a gapek vizsgálata volt az első, majd az entrópia függvények és a dimer rend vizsgálata következett.

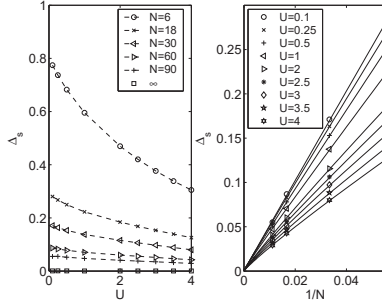
### 5.5.1. $n = 3$

Az 5.8. és az 5.9. ábra az 5.5. és 5.6. ábrákhoz hasonlóan a  $\Delta_s$  spingap és a  $\Delta_c$  töltésgap  $U$  rácsponton belüli Coulomb-csatolás függését, illetve a gapek végesméret-extrapolációját mutatja  $1/N$  függvényében az  $SU(3)$  Hubbard-modell esetében.

Jól látszik, hogy a  $\Delta_s$  spingap mindegyik véges  $N$  lánc hossz esetén  $U$  csökkenő függvénye és termodinamikai határesetben  $1/N$ -nél lassabban, de zérushoz tart bármely  $U$  érték mellett. A (2.13) feltevés alapján végzett extrapoláció a  $\Delta_s = 0,003(2)$  felső korlátot adja a spingap értékére az  $N \rightarrow \infty$  határesetben. Javíthatjuk az extrapoláció pontosságát, ha

---

<sup>5</sup>Páratlan  $n$  esetén a szigetelő fázis a következő képpen értelmezhető: a töltéseloszlás homogén [Sz, 2007] és a diszkrét eltolásinvariancia periódusa megváltozik, ún. kötés-dimerizáció valósul meg. Tehát úgy tűnik ezekben a rendszerekben a Mott-mechanizmus helyett a Peierls-mechanizmus játszik szerepet, így statikus rácsstorzulás lép fel.

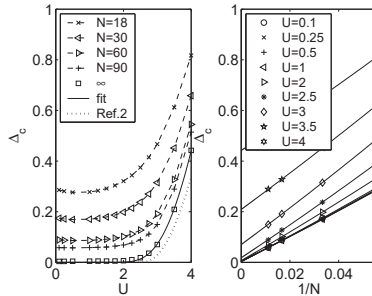


**5.8. ábra.** A  $\Delta_s$  spingap egy rácsponton ható Coulomb-kölcsönhatás függése és végesméret-skálázódása az  $SU(3)$  Hubbard-model esetében  $1/3$  betöltöttség mellett (az 5.1. ábra megfelelője).

a

$$\Delta(N) = \Delta + a/N^b \quad (5.9)$$

feltevéssel élünk, ahol a  $b$  exponens szabad paraméter. Termodinamikai határesetben ez az illesztés  $\Delta_s = 0.0006(3)$  maximális spingap-értéket eredményez, miközben a  $b$  exponens értéke a  $[0.9, 0.98]$  intervallumban változik. Korábban már meggyőződünk róla, hogy számítási pontosságunkat figyelembe véve, az  $5 \cdot 10^{-4}$  vagy annál kisebb gap értékeket zérusnak kell tekintenünk, így azt mondhatjuk, hogy az  $N \rightarrow \infty$  határesetben a korábbi eredményeknek megfelelően a  $\Delta_s$  spingap eltűnik tetszőleges pozitív  $U$  mellett.



**5.9. ábra.** A  $\Delta_c$  töltésgap egy rácsponton ható Coulomb-kölcsönhatás függése és végesméret-skálázódása az  $SU(3)$  Hubbard-model esetében  $1/3$  betöltöttség mellett (az 5.2. ábra megfelelője).

Ezzel ellentétben a  $\Delta_c$  töltésgap minden véges lánc hossz mellett  $U$  monoton növekvő függvénye és  $U$  minden értékénél (nem csak  $U > 1$  esetén) véges a termodinamikai határesetben. Azaz kicsi, de véges töltésgapet kaptunk a végesméret-extrapoláció eredményeként. A  $\Delta_c$  töltésgap  $N \rightarrow \infty$ -ben felvett értékeit az 5.3. táblázatban foglaltuk össze.

**5.3. táblázat.** Az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetbe extrapolált  $\Delta_c$  töltésgap-értékek  $1/3$  betöltöttség mellett az  $SU(3)$  Hubbard-modell esetében.

$U$	$\Delta_c$
0,1	0,0037(4)
0,25	0,0039(5)
0,5	0,0043(4)
1,0	0,0048(4)
1,25	0,0049(4)
1,5	0,0051(4)
1,75	0,0053(3)
2,0	0,0065(3)
2,25	0,0101(3)
2,5	0,0183(2)
2,75	0,0360(2)
3,0	0,0702(2)
3,5	0,2090(1)
4,0	0,4421(1)

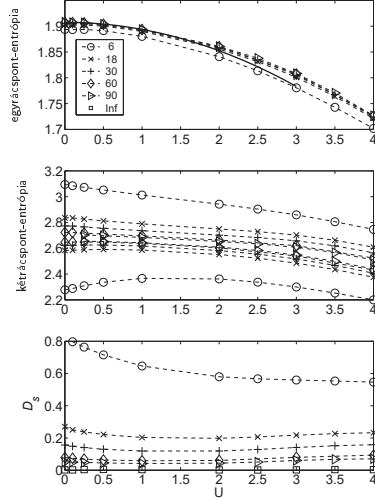
Látható, hogy a  $\Delta_c$  töltésgapra a [As, 1999]-ben szereplőnél nagyobb értékeket kaptunk. Az eltérésnek az lehet az oka, hogy [As, 1999]-ben a leghosszabb lánc is csak  $N = 30$  rácspontot tartalmazott, a (2.13)-ban megjelenő  $1/N^2$ -es korrekciók viszont csak nagyobb rendszerméretek esetében figyelhetők meg.

Az extrapolált  $\Delta_c$  töltésgap értékekre, ahogyan korábban, a (5.6)-ban felírt négy-paraméteres görbét illesztettük (folytonos vonal az 5.9. ábra jobb oldali részábráján)  $U_c = 0,03$  ( $\kappa = 2 \cdot 10^{-4}$ ) eredménnyel ( $a = 8,68$ ,  $c = 28,12$  és  $\sigma = 1,62$ ). Rögzített  $\sigma = 1/2$  mellett megismételve az illesztést, ahogyan Assaraf és munkatársai [As, 1999] tették,  $U_c = 0,36$  ( $\kappa = 2 \cdot 10^{-3}$ ) adódik.

Ha összehasonlítjuk a fenti eredményeket a [As, 1999]-ben közöltekkel, a következőket találjuk: az  $U$  függvényében ábrázolt  $\Delta_c(U)$  töltésgap görbéje esetünkben egyértelműen az [As, 1999]-ben közzétett és a 5.9. ábrán szaggatott vonallal berajzolt görbe fölött fut, ennek megfelelően a kritikus  $U_c$ -re is jóval kisebb értéket kaptunk, mint a [As, 1999]-ben közölt. Bár Assaraf és munkatársai úgy találták, hogy az  $U_c \in [0, 2,2]$  értékek jól illeszthetők az adatpontjaikra, mégis a legjobb becslésük  $U_c = 2,2$  volt<sup>6</sup>. Ezzel szemben mi legalább egy

<sup>6</sup>A [As, 1999]-ban közölt legjobb illesztés eredménye  $a = 45,050$ ,  $c = 6,567$ ,  $\sigma = 1/2$  és  $U_c = 2,2$  volt.

nagyságrenddel kisebbre becsljük a kritikus  $U_c$  értéket.



**5.10. ábra.** A láncok közepén,  $i = N/2$ -nél meghatározott egyrácpont- és kétrácpont-entropia, valamint a kétrácpont-entropia dimerizációja az  $U$  rácsponton belüli Coulomb-kölcsönhatásfüggvényében ábrázolva az  $SU(3)$  Hubbard-modell esetén  $1/3$  betöltöttség mellett (az 5.3. ábra megfelelője).

Mivel a gapek numerikus vizsgálatával nem sikerült egyértelmű választ találnunk arra a kérdésre, hogy mely kritikus  $U_c$  értéknél megy végbe a Mott-átalakulás, megvizsgáltuk a rácspont-entropiák viselkedését is az  $U$  Coulomb-csatolás függvényében. Eredményeinket az 5.10. ábra mutatja. Jól látható, hogy sem az egyrácpont-, sem a kétrácpont-entropia függvény viselkedésében nem fedezhető fel semmiféle anomália, az egyrácpont-entropia függvény  $U = 0$ -ban maximális, továbbá az  $SU(2)$  modellhez hasonlóan most is jól illeszkedik az  $s_0 + BU^2$  parabola az egyrácpont-entropia adatpontjaira kis  $U$  értékek mellett ( $s_0 = 1,908(2)$ ,  $B = 0,0138(1)$ ).

Az egyrácpont-entropiánál tapasztaltakkal ellentétben a kétrácpont-entropia függvény véges  $N$  lánc hosszak esetében nem  $U = 0$ -ban maximális, azonban termodinamikai határesetet közelítve ez a maximumhely elmozdul és  $N \rightarrow \infty$  esetén az egyrácpont-entropia maximumához hasonlóan  $U = 0$ -ba kerül, miközben a kétrácpont-entropia dimerizációja eltűnik  $U$  minden vizsgált értéke mellett.

Végül soron a numerikus számításaink eredménye alapján arra következtethetünk, hogy



a kritikus  $U_c$  érték a szakirodalomban közölt  $U_c = 2,2$ -nél sokkal kisebb, úgy gondoljuk, hogy a legvalószínűbb  $U_c$  érték zérus. Az alapállapot pedig, az  $SU(2)$  Hubbard-modellhez hasonlóan, nem dimerizált.

### 5.5.2. $n > 3$

A 5.2.2. szakaszban már szó volt róla, hogy  $\chi_{\max} = 10^{-5}$  pontosság mellett csak viszonylag rövid láncokat tudunk vizsgálni, ha  $n > 3$ . Ennek megfelelően ismételten csak  $U$  egy nagy értékénél,  $U = 4$ -nél számoltuk az energiagapokat annak érdekében, hogy összehasonlíthassuk eredményeinket a [As, 1999]-ben közölt kvantumos Monte-Carlo-számítás eredményeivel. Az extrapolált spin- és töltésgapokra  $\Delta_s = 0,05(3)$  és  $\Delta_c = 0,21(2)$  értékek adódtak. Az  $SU(3)$  esethez hasonlóan ezek a gap értékek kicsivel nagyobbak, mint a [As, 1999] gapjei. A  $\Delta_s$  spingapre kapott kicsi, de véges érték miatt nem állíthatjuk határozottan, hogy a gap eltűnik, ezért a rácspont-entrópia függvényeket is megvizsgáltuk.

Az  $SU(4)$  Hubbard-modell  $1/n$  betöltöttség mellett az  $SU(2)$ , illetve az  $SU(3)$  modelleknél látott módon viselkedik, azaz

1. az egyrácspont-entrópia  $U = 0$ -ban veszi fel a maximumát és kis  $U$  értékeknél parabolikusan változik ( $s_0 = 2,235(5)$ ,  $B = 0,138(1)$ ),
2. semelyik rácspont-entrópia függvény nem mutat anomális viselkedést,
3. a kétrácspont-entrópia dimerizációja az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben  $U$  semilyen vizsgált értékénél nem haladja meg a  $D_s = 0,02(3)$  értéket, ami reguláris alapállapotra enged következtetni.

Az  $n = 2, 3$  és  $4$  modellek esetében tapasztalt hasonló viselkedés alapján úgy gondoljuk, hogy, bár Assaraf és munkatársai  $U < 2,8$  esetén eltűnő  $\Delta_c$  töltésgapról számoltak be [As, 1999], a töltésgap mégis exponenciálisan lassan nyílik a kritikus  $U_c = 0$  értéknél.

Az  $SU(5)$  Hubbard-modell esetében is megvizsgáltuk a rácspont-entrópia függvények viselkedését<sup>7</sup> és a többi,  $n = 2, 3$  és  $4$ ,  $1/n$  betöltöttségű modelleknél tapasztaltakhoz hasonló eredményeket kaptunk: a rácspont-entrópiák  $U$  síma, folytonos függvényei és az egyrácspont entrópia  $U = 0$ -ban maximális. Ezért feltételezhetjük, hogy  $n = 5$  esetében is  $U_c = 0$ -ban megy végbe a Mott-átalakulás.

<sup>7</sup>A legnagyobb láncossz, amivel dolgozni tudtunk  $N = 30$  rácspontot tartalmazott, így végesméret-extrapoláció pontossága nem lehetett elfogadható pontosságú, tehát az eredmények ismételten csak tendenciákat, a rendszer kvalitatív viselkedését mutatták meg.

## 5.6. Dimerizáció és a kritikus Coulomb-taszítás

A DMRG algoritmust alkalmazva vizsgáltuk az egydimenziós  $SU(n)$  ( $n = 2, 3, 4$  és  $5$ ) Hubbard-modellt. Numerikus számításaink pontosságát az egy renormálási lépésben bekövetkező  $\chi$  kvantuminformáció-vesztesség maximalizálásával kontrolláltuk, az így megkövetelt számítási pontosság határozta meg a még éppen kezelhető maximális rendszer méretet is. Módszerünket az  $SU(2)$  Hubbard-modellen teszteltük. Számításaink során az energiagapokat (spin és töltés), valamint egyrácspon- és kétrácspon-entrópiákat vizsgáltuk  $U$  függvényében.

Először a félig töltött modellekkel foglalkoztunk. Megmutattuk, hogy mind a töltés-, mind a spingapok végesek a Coulomb-taszítás tetszőleges értékénél és mindkét gap exponenciálisan lassan nyílik, ami  $U_c = 0$ -nál végbemenő, Berezinszkij–Kosterlitz–Thouless típusú fázisátalakulásra enged következtetni. Megerősítettük azt a feltevést [Ma, 1989], hogy páros  $n$  értékeknél dimerizálttá válik a rendszer alapállapota és kimutattuk a dimerizációt páratlan  $n$ -ek esetén is, páratlan  $n$ -eknél pontosan úgy viselkedett a rendszer, mint ahogyan páros  $n$  értékeknél.

Az  $1/n$  betöltöttségű modellek vizsgálatával zártuk munkánkat. Megmutattuk, hogy az  $1/3$  betöltöttségű  $SU(3)$ , az  $1/4$  betöltöttségű  $SU(4)$  és az  $1/5$  betöltöttségű  $SU(5)$  modellek viselkedése nem különbözik a félig töltött  $SU(2)$  modellnél tapasztaltaktól. A spingap zérus, a töltésgap pedig exponenciálisan lassan nyílik  $U > 0$  esetén. A gap nyílásának numerikus analízise és a rácspon-entrópia függvények vizsgálata  $U_c = 0$  kritikus Coulomb-taszítás értékénél végbemenő Berezinszkij–Kosterlitz–Thouless típusú fázisátalakulásra engednek következtetni. Numerikus számításaink pontosságát figyelembe véve, nem zárhatjuk ki a véges, de kicsi  $U_c < 0,1$  lehetőségét, de azt biztosan állíthatjuk, hogy a Mott-átalakulás az irodalomban [As, 1999] szereplő  $U_c$ -nél jóval kisebb Coulomb-taszítás értékénél megy végbe. A rendszer alapállapota nem volt dimerizált.

Ebből a fejezetből az energiagapok meghatározása tekinthető önálló eredménynek, valamint annak kimutatása, hogy  $1/n$  betöltöttség esetén az  $U_c$  kritikus Coulomb-taszítás jóval a [As, 1999]-ben szereplő érték alatt van.

## 6. fejezet

# Semleges-ionos átalakulás vizsgálata

A nyomás- és néhány esetben a hőmérsékletváltozás hatására bekövetkező semleges-ionos átalakulást először a nyolcvanas években figyelték meg szerves töltésátviteli sókban [Va, 1981, To, 1981]. Azóta két, látszólag különböző modellt javasoltak a szakirodalomban a semleges-ionos átalakulás leírására, az ionos Hubbard-modellt és a donor-akceptor modellt. Mi is a semleges-ionos átalakulás e két egydimenziós modelljével fogunk foglalkozni ebben a fejezetben.

A következő, 6.1. szakaszban meg fogjuk látni, hogy milyen feltevésekkel kell élnünk a donor-akceptor és az ionos Hubbard-modell esetében és fel fogjuk írni a modelleket definiáló Hamilton-operátorokat. Majd röviden áttekintjük a szakirodalom semleges-ionos átalakulással kapcsolatos eredményeit.

Meg fogjuk látni, hogy e két modell alapvetően eltérő fázisdiagramhoz vezet. A 6.2. szakaszban azzal foglalkozunk, hogy hogyan lehet ezt a két, látszólag egymásnak ellentmondó modellt, néhány ésszerű elhanyagolást követően egyesíteni és így visszavezetni a semleges-ionos átalakulás tárgyalását egy effektív  $S = 1$  spinmodell vizsgálatára. A semleges-ionos átalakulás egyesített modelljének levezetését követően a modell fázisdiagramjának meghatározásával fogunk foglalkozni.

A 6.3 szakaszban sorra vesszük azokat a mennyiségeket, melyek alkalmasak lehetnek a fázisátalakulási pontok meghatározására. Ilyen mennyiségek az energiagapok (6.3.1. szakasz), a megfelelő rendparaméterek (6.3.2. szakasz) és a rácspont-entrópiák. A numerikus számításaink pontosságának, illetve a DMRG algoritmus paraméterezésének bemutatását követően (6.3.3. szakasz) számításaink eredménye következik (6.4. szakasz). Az én fő

feladatomban ismételtelen az energiagapok numerikus számítása és a kapott eredmények kiértékelésével a fázisdiagram meghatározása volt.

A fejezet legvégén fogjuk felrajzolni az egyesített modell fázisdiagramját (6.4.4. szakasz), ami megmagyarázza és feloldja az ionos Hubbard- és a donor-akceptor modellek között fennálló, a következőekben részletezésre kerülő látszólagos ellentmondást. Munkánk összefoglalása a 6.5. szakaszban olvasható.

## 6.1. A semleges-ionos átalakulás modelljei és az ismert eredmények

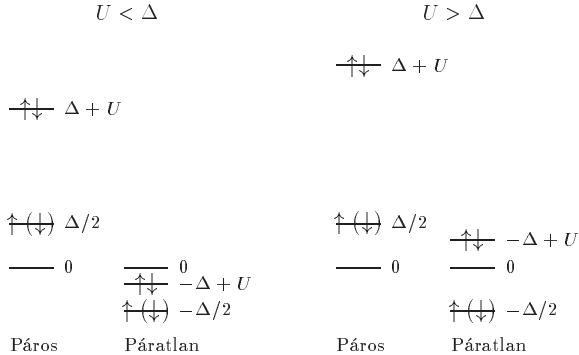
Ha feltehetjük, hogy az egymással kölcsönható molekulák láncai közötti csatolás elegendően gyenge, akkor modellezhetjük a rendszert egy egydimenziós láncsal, melyben két típusú molekula váltakozik. Torrence és Hubbard [Hu, 1981] javasolta, hogy az alternáló molekulák közötti különbséget a rácsponti (atomon belüli) energiában ( $\Delta$ ) vegyük figyelembe, míg a különböző spinű elektronok között ható atomon belüli Coulomb-taszítás ( $U$ ) maradjon azonos a lánc minden rácspontjában. Ha feltételezhetjük, hogy elegendő egyetlen elektronpályát figyelembe venni minden rácspontban és a szokásos módon írjuk fel a szomszédos molekulák közötti átfedési integrált, akkor az ionos Hubbard-modellhez jutunk, melyet a következő Hamilton-operátor definiál:

$$\mathcal{H} = t \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \Delta \sum_i (-1)^i n_i, \quad (6.1)$$

ahol  $c_{i\sigma}^\dagger$ , illetve  $c_{i\sigma}$  jelöli az  $i$ -edik rácsponton  $\sigma$  spinű elektront keltő és eltüntető operátorokat,  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  és  $n_i = \sum_\sigma n_{i\sigma}$  pedig az  $i$ -edik rácsponton értelmezett részecskeszámoperátorok,  $t$  az átfedési mátrixelem,  $U$  a Coulomb-taszítás és  $\Delta$  az alternáló molekulák közötti atomon belüli energiakülönbség.

Doktori munkám során mi azzal az esettel foglalkoztunk, amikor pontosan annyi elektront tartalmaz a molekulalánc, mint amennyi rácspontot. Ilyen betöltöttség mellett, atomi közelítésben (6.1. ábra) a  $\Delta$  atomon belüli energiakülönbség és az  $U$  Coulomb-taszítás közötti versengés dönti el, hogy a rendszer sávszigetelő, vagy korrelált Mott-szigetelőként viselkedik. Ha elfeledkezünk az átugrási folyamatokról, akkor a következőt olvashatjuk le a 6.1. ábráról:

1. Ha a Coulomb-taszítás kisebb, mint a lokális energiakülönbség, azaz  $U < \Delta$ , akkor a



**6.1. ábra.** Az ionos Hubbard-modell energiaszintjei atomi közelítésben.  $U < \Delta$  esetben a duplán betöltött páratlan és az üres páros rácspontok jelentik az energetikailag legkedvezőbb konfigurációt, a rendszer sávszigetelő.  $U > \Delta$  esetén a rendszer korrelált Mott-szigetelő, minden egyes rácsponton egy elektron ül. A fázisátmenetet  $U = \Delta$ -nál találjuk.

duplán betöltött páratlan és az üres páros rácspontokból álló rácspontpárok jelentik az energetikailag legkedvezőbb konfigurációt. Ekkor egy ilyen rácspontpár energiája  $E = U - \Delta < 0$ .

- Ellenkező esetben, mikor Coulomb-taszítás meghaladja az atomon belüli energia különbségének értékét ( $U > \Delta$ ), akkor az jelenti a legkisebb energiájú konfigurációt, mikor minden egyes rácsponton egy elektron ül. Az elektronok spinjére semmilyen megkötés nincsen, az alapállapot degenerált. Egy ilyen rácspontpár energiája éppen  $E = 0$ .

A sávszigetelő állapotban ( $U < \Delta$ ) a töltés- és a spingap is véges, míg a korrelált Mott-szigetelő állapotban a spingap záródik, csak a töltésgap marad véges. A két állapot közötti fázisátmenetet  $U = \Delta$ -nál találjuk.

Fabrizio és munkatársai 1999-ben arra az eredményre jutottak [Fa, 2000], hogy az átfedési integrál véges értéke mellett a fenti fázisátalakulás két lépésben zajlik le. A sávszigetelő (semleges) és a korrelált Mott-szigetelő (ionos) állapotokat egy ionos dimerizált fázis váltja el.  $U$ -t növelve a töltésgap egy kritikus  $U_{c1}$ -nél záródik, majd azonnal újra nyílik, a spingap pedig egy másik kritikus  $U_{c2}$  értéknél tűnik el. Az első átalakulás ( $U = U_{c1}$ ) Ising típusú, míg a második átalakulás,  $U = U_{c2}$ -nél Berezinskij–Kosterlitz–Thouless típusú.

Fabrizioék vizsgálatait követően jónéhány publikáció jelent meg a szakirodalomban,

melyekben az ionos Hubbard-modellt vizsgálják numerikus és analitikus módszerekkel egyaránt: [To, 2001, Zh, 2003, Ka, 2003, Ma, 2004, So, 2004, Al, 2004, Tin, Le, 2006]. A diszkusszió végén Fabrizioék két fázisátalakulási feltevése helyesnek bizonyult. Még a molekulák közötti Coulomb-kölcsönhatás figyelembevétele [Al, 2004, Br, 1983] sem változtatott a kvalitatív fizikai képen.

A semleges-ionos átalakulást leíró másik modell, a donor-akceptor modell alapfeltevése az, hogy a lokális Coulomb-energia a legnagyobb a probléma energiaskáláján, így célszerűen feltételezhetjük, hogy az atomon belüli Coulomb-kölcsönhatás egyedüli szerepe az, hogy megakadályozza a többszörösen (kétszeresen) ionizált molekulák létrejöttét. Ha ez valóban így van, akkor nem a Coulomb-kölcsönhatás felelős a semleges-ionos átalakulásért.

A donor-akceptor modellben, melyet a nyolcvanas évek közepén Avignon és munkatársai [Av, 1986], Girlando és Painelli [Gi, 1988], illetve Horovitz és Sólyom [Ho, 1987] részletesen tanulmányozott, donor és akceptor molekulák váltakoznak egy egydimenziós lánc mentén.

Semleges állapotában ( $D^0$ ) a donor molekulák legmagasabban fekvő betöltött molekulapályáját<sup>1</sup> két ellentétes spinű elektron foglalja el. Jelöljük  $I$ -vel az ionizációs energiát. Ekkora energiabefektetés árán tudunk eltávolítani egy elektront  $D^0$ -ról, hogy ezzel létrehozzunk egy egyszeresen ionizált,  $D^+$  donor molekulát. Ha  $U_D$  jelöli az atomon belüli Coulomb-taszítást, akkor a kétszeresen ionizált,  $D^{2+}$  donor molekula  $2I + U_D$  energiatöbblettel rendelkezik a semleges,  $D^0$  donor molekulához képest. Így, ha a semleges konfigurációhoz viszonyítjuk a rendszer energiáját, akkor a következő Hamilton-operátorral írhatjuk le a donor molekulákat:

$$\mathcal{H}_D = I \sum_{\text{donor}} (2 - n_i) + U_D \sum_{\text{donor}} (1 - n_{i\uparrow})(1 - n_{i\downarrow}). \quad (6.2)$$

Jól látszik, hogy  $U_D \gg I$  esetben az atomon belüli Coulomb-kölcsönhatás egyedüli szerepe az, hogy tiltottá változtassa a kétszeresen ionizált donor állapotot.

Az akceptor molekulák semleges állapotában ( $A^0$ ) az akceptor molekulák legalacsonyabban fekvő betöltetlen molekulapályája<sup>2</sup> üres. Egyszeres betöltöttség esetén (egyszeresen ionizált  $A^-$  akceptor molekula) az energia  $A$ -val, az akceptor molekula elektronaffinitásával csökken, míg kétszeres betöltöttség esetén (kétszeresen ionizált  $A^{2-}$  akceptor molekula) az atomon belüli Coulomb-taszítás következtében fellépő  $U_A$  energiatöbblettel is számolnunk

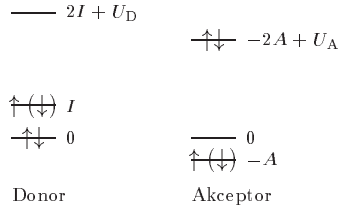
<sup>1</sup>Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO)

<sup>2</sup>Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO)

kell. Az akceptor molekulákat az alábbi Hamilton-operátor írja le:

$$\mathcal{H}_A = -A \sum_{\text{akceptor}} n_i + U_A \sum_{\text{akceptor}} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (6.3)$$

A donor molekulákhoz hasonlóan, ha  $U_A \gg A$ , akkor a lokális Coulomb-kölcsönhatás egyedül a kétszeresen ionizált akceptor molekulák ( $A^{2-}$ ) létrejöttét akadályozza meg. A 6.2. ábra a donor és akceptor molekulák atomi energiaszintjeit foglalja össze.



**6.2. ábra.** A donor és akceptor molekulák atomi energiaszintjeinek sematikus ábrázolása. Jól látható az egyszerűsítés lehetősége:  $U_D \gg I$  és  $U_A \gg A$  esetén a kétszeresen ionizált donor ( $D^{2+}$ ) és akceptor ( $A^{2-}$ ) állapotokat elhanyagolhatjuk.

Ha feltételezhetjük, hogy az  $I$  ionizációs energia és az  $A$  elektronegativitás a donor és akceptor molekulák rögzített, belső paramétere, valamint  $I - A > 0$ , akkor a rendszer alapállapota semleges és nem következik be fázisátalakulás, a rendszer nem válik ionossá. A fázisátalakulást csak a molekulák közötti  $V$  Coulomb-kölcsönhatás (elsősorban a kölcsönhatás az ellentétesen ionizált  $D^+$  donor és  $A^-$  akceptor molekulák között) figyelembe vételével kapunk,

$$\mathcal{H}_C = -V \sum_{\text{donor}} (2 - n_i) n_{i+1} - V \sum_{\text{akceptor}} n_i (2 - n_{i+1}). \quad (6.4)$$

A fenti, atomi közelítésben a fázisátalakulás  $V = I - A$ -nál következik be.

A donor-akceptor modell Hamilton-operátorában a már megismert tagokon felül még figyelembe kell vennünk a szomszédos donor és akceptor molekulák közötti átfedési integrált is, melyet a következőképpen írhatunk:

$$\mathcal{H}_{CT} = t \sum_{\text{összes, } \sigma} \left( c_{i+1\sigma}^\dagger + c_{i+\frac{1}{2}\sigma}^\dagger \right). \quad (6.5)$$

A  $t$  átfedési integrál véges értékei mellett a lánc molekulái mindig, legalább részlegesen ionizáltak, így az atomi határeset  $V = I - A$ -nál bekövetkező éles, elsőrendű, semleges-ionos fázisátalakulását a  $\mathcal{H}_{CT}$  kölcsönhatási tag hatása elkenheti.

A szakirodalomban megjelent egzakt diagonalizációt [Ho, 1987] és vegyértékkötés-módszert alkalmazó számítások [Gi, 1988, So, 1978] valóban alátámasztják ezt a feltételezést.  $t \leq 0,15(I - A)$  esetén elsőrendű, míg  $t > 0,15(I - A)$  esetén másodrendű, vagy Berezinszkij–Kosterlitz–Thouless típusú fázisátalakulásról számolnak be. A töltés-, spin- és a töltésátviteli (charge-transfer) gapek mindegyike záródik a Coulomb-vonzás egy kritikus  $V_c$  értékénél, ahol a töltésgap rögtön újra nyílik ellentétben a spin- és a töltésátviteli gapekkel.

Rendelkezésünkre áll tehát egy jelenség, a semleges-ionos fázisátalakulás, két modellje. Azonban e két modell alapvetően különbözik. Más kölcsönhatás játszik szerepet az átalakulás létrejöttében az ionos Hubbard-modell (atomon belüli Coulomb-taszítás) és megint más a donor-akceptor modell (ellentétesen ionizált donor és akceptor molekulák közötti Coulomb-vonzás) esetében. Ráadásul az ionos Hubbard-modell vizsgálata két folytonos fázisátalakuláshoz vezet ellentétben a donor-akceptor modellel. Tehát nem csupán a fázisok száma, hanem úgy tűnik, hogy a fázisátalakulások jellege is különbözik a két modellben, holott ugyanazt a jelenséget hivatottak magyarázni. Ezen a ponton kapcsolódtunk be a semleges-ionos átalakulás vizsgálatába.

Korábban már utaltunk rá, hogy a donor-akceptor modellel, ha feltételezhetjük, hogy a Coulomb-taszítás következtében nem jönnek létre kétszeresen ionizált molekulák, egyszerűsíthetjük. Nem ennyire kézenfekvő, de hasonló egyszerűsítést végezhetünk el az ionos Hubbard-modell esetében is. Az átalakításokat követően az eredeti elektronállapotokat  $S = 1$  spinállapotoknak feleltethetjük meg és az így kapott effektív spinmodellek csatolási állandóit is kapcsolatba hozhatjuk, így egy olyan egyesített modellhez juthatunk, mely bizonyos feltételek mellett mindkét modell viselkedését tükrözi. Lássuk pontosan miről is van szó!

## 6.2. Egyesített Hamilton-operátor

Említettük már, hogy a donor-akceptor modellben feltételezhetjük, hogy a lokális Coulomb-energia a legnagyobb a probléma energiaskáláján, így joggal tekinthetjük a  $U_D, U_A \rightarrow \infty$  határesetet. Ha rápillantunk a 6.2. ábrára, azonnal láthatjuk, hogy ebben a közelítésben a kétszeresen betöltött akceptor ( $A^{2-}$ ) és az üres donor ( $D^{2+}$ ) állapotok tiltottá válnak, azaz minden rácspontban csak három lehetséges elektronállapotunk marad. Ennek megfelelően



**6.1. táblázat.** A félig töltött donor-akceptor modell összetartozó rácspontpárjainak energiája atomi kö-zelítésben.  $U_D, U_A \ll I, A$ , így a kétszeresen betöltött akceptor ( $A^{2-}$ ) és az üres donor ( $D^{2+}$ ) állapotok elhanyagolhatók.

Donor rácspont	Akceptor rácspont	Energia	Állapot
$ \uparrow\downarrow\rangle$	$ 0\rangle$	0	nem elhanyagolható
$ \uparrow\rangle,  \downarrow\rangle$	$ \downarrow\rangle,  \uparrow\rangle$	$I - A$	nem elhanyagolható
$ 0\rangle$	$ \uparrow\downarrow\rangle$	$2I + U_D - 2A + U_A$	elhanyagolható

leképezhetjük a donor-akceptor modell elektronállapotait  $S = 1$  spinállapotokra, azaz le-hetőségünk nyílik egy alacsonyabb szabadsági fokú effektív  $S = 1$  spinmodellen számolni az eredeti fermionmodell helyett. A donor és akceptor atomok energiáit a 6.1. táblázat, míg a leképezést az 6.3. ábra mutatja.

$ 0\rangle$	$\longrightarrow$	tiltott	$ 0\rangle$	$\longrightarrow$	$ 0\rangle$
$ \uparrow\rangle$	$\longrightarrow$	$ 1\rangle$	$ \uparrow\rangle$	$\longrightarrow$	$ 1\rangle$
$ \downarrow\rangle$	$\longrightarrow$	$ -1\rangle$	$ \downarrow\rangle$	$\longrightarrow$	$ -1\rangle$
$ \uparrow\downarrow\rangle$	$\longrightarrow$	$ 0\rangle$	$ \uparrow\downarrow\rangle$	$\longrightarrow$	tiltott
Donor			Akceptor		

**6.3. ábra.** A donor és akceptor molekulák megengedett elektronállapotainak leképezése  $S = 1$  spinál-la-potokra.

A leképezésből kiolvashatjuk, hogy egy tetszőleges,  $\uparrow$  vagy  $\downarrow$  spinű elektron átugrása egy semleges donor atomról (tfh. a  $2j - 1$ -edik rácspont<sup>3</sup>) a szomszédos, szintén se-mleges akceptor (tfh. a  $2j$ -edik rácspontra) atomra, azaz a  $D_{2j-1}^0 A_{2j}^0 \rightarrow D_{2j-1}^+ A_{2j}^-$  folyamat a spinállapotokkal egyszerű kicserélődésként írható:  $|0\rangle_{2j-1} |0\rangle_{2j} \rightarrow |-1\rangle_{2j-1} |1\rangle_{2j}$ , vagy  $|0\rangle_{2j-1} |0\rangle_{2j} \rightarrow |1\rangle_{2j-1} |-1\rangle_{2j}$ . Természetesen a kicserélődési folyamat ellentéte is végbe-mehet, viszont nem jöhet létre átugrás neutrális donor ( $D^0$ ) és ionizált akceptor ( $A^-$ ), illetve neutrális akceptor ( $A^0$ ) és ionizált donor ( $D^+$ ) között valamint olyan szomszédos ionizált donor és akceptor atomok között, melyekhez párhuzamos spinű elektronok tarto-znak. Mindezek alapján, ha még azt is figyelembe vesszük, hogy a  $D_{2j-1}^0 A_{2j}^0 \rightarrow D_{2j-1}^+ A_{2j}^-$  és  $A_{2j}^0 D_{2j+1}^0 \rightarrow A_{2j}^- D_{2j+1}^+$ , illetve a  $D_{2j-1}^+ A_{2j}^- \rightarrow D_{2j-1}^0 A_{2j}^0$  és  $A_{2j}^+ D_{2j+1}^- \rightarrow A_{2j}^0 D_{2j+1}^0$  típusú folyamatok az elektronok fermion jellegéből adódóan ellentétes előjellel jelennek meg, az

<sup>3</sup>A rácspontok így módon történő indexelésének a későbbiekben lesz csak szerepe, mikor azonosítani fogjuk a donor-akceptor modell donor atomjait az ionos Hubbard-modell páratlan rácspontban ülő molekuláival és az akceptor atomokat pedig a páros rácspontokkal.

alábbi formulával adhatjuk meg az effektív  $S = 1$  spinmodellben az átugrási tagot:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{CT}} = & -\frac{1}{2}t \sum_{\text{összes}} S_i^z S_{i+1}^z (S_i^+ S_{i+1}^- - S_i^- S_{i+1}^+) \\ & + \frac{1}{2}t \sum_{\text{összes}} (S_i^+ S_{i+1}^- - S_i^- S_{i+1}^+) S_i^z S_{i+1}^z, \end{aligned} \quad (6.6)$$

ahol  $S_i^+$  és  $S_i^-$  a szokásos spinvetület növelő és csökkentő operátorok<sup>4</sup>,  $S_i^z$  pedig a spin  $z$  irányú vetületét méri.  $\mathcal{H}_{\text{CT}}$  első tagja a  $D^0 A^0 \rightarrow D^+ A^-$  és  $A^0 D^0 \rightarrow A^- D^+$  típusú kicserélődést írja le, míg a második tag a  $D^+ A^- \rightarrow D^0 A^0$  és  $A^+ D^- \rightarrow A^0 D^0$  típusú folyamatokat. Az  $S_i^z S_{i+1}^z$  szorzat biztosítja, hogy ne alakulhassanak ki tiltott, kétszeresen ionizált molekulaállapotok.

Mielőtt továbbmennénk, bár a továbbiak szempontjából nem lényeges, meg kell jegyeznünk, hogy a spinoperátorokra vonatkozó kommutációs szabályok felhasználásával a (6.6)-ban felírt  $\mathcal{H}_{\text{CT}}$  töltésátvitelt leíró tag a következő formára hozható:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{CT}} = & -\frac{1}{2}t \sum_i S_i^z (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \\ & - \frac{1}{2}t \sum_i (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) S_{i+1}^z. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Könyven ellenőrizhető, hogy a spinoperátorokkal

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{D}} &= I \sum_{\text{donor}} (S_i^z)^2, \\ \mathcal{H}_{\text{A}} &= -A \sum_{\text{akceptor}} (S_i^z)^2, \\ \mathcal{H}_{\text{C}} &= -V \sum_{\text{összes}} (S_i^z)^2 (S_{i+1}^z)^2. \end{aligned} \quad (6.8)$$

alakban felírt donor, akceptor és Coulomb tagok éppen azokat a mátrixelemeket adják, mint  $\mathcal{H}_{\text{D}}$ ,  $\mathcal{H}_{\text{A}}$  és  $\mathcal{H}_{\text{C}}$ . Mi azzal az esettel foglalkozunk, mikor az elektronok és a rácspontok száma éppen megegyezik, ebben az esetben a töltésmegmaradás a következő egyenlőség

---

<sup>4</sup>A fermion képpen ezek egy elektront tesznek az adott rácspontra, illetve eltávolítják azt.

teljesülését írja elő:

$$\sum_{\text{donor}} (S_i^z)^2 = \sum_{\text{akceptor}} (S_i^z)^2. \quad (6.9)$$

Ezt felhasználva a Hamilton-operátor  $\mathcal{H}_D$  donor és  $\mathcal{H}_A$  akceptor molekulákat leíró tagjait összevonhatjuk:

$$\mathcal{H}_D + \mathcal{H}_A = \frac{1}{2}(I - A) \sum_{\text{összes}} (S_i^z)^2. \quad (6.10)$$

Ezzel fel is írtuk a donor-akceptor modellnek megfelelő effektív  $S = 1$  spinmodell Hamilton-operátorát. Mielőtt tovább mennénk, meg kell még említeni, hogy Sölyom és Horovitz

$ 0\rangle \longrightarrow$ tiltott	$ 0\rangle \longrightarrow$ $ 0\rangle$
$ \uparrow\rangle \longrightarrow$ $ 1\rangle$	$ \uparrow\rangle \longrightarrow$ $- 1\rangle$
$ \downarrow\rangle \longrightarrow$ $ -1\rangle$	$ \downarrow\rangle \longrightarrow$ $ -1\rangle$
$ \uparrow\downarrow\rangle \longrightarrow$ $ 0\rangle$	$ \uparrow\downarrow\rangle \longrightarrow$ tiltott
Donor atom a $4j - 3$ -adik rácsponon	Akceptor atom a $4j - 2$ -edik rácsponon
$ 0\rangle \longrightarrow$ tiltott	$ 0\rangle \longrightarrow$ $ 0\rangle$
$ \uparrow\rangle \longrightarrow$ $- 1\rangle$	$ \uparrow\rangle \longrightarrow$ $ 1\rangle$
$ \downarrow\rangle \longrightarrow$ $- -1\rangle$	$ \downarrow\rangle \longrightarrow$ $- -1\rangle$
$ \uparrow\downarrow\rangle \longrightarrow$ $ 0\rangle$	$ \uparrow\downarrow\rangle \longrightarrow$ tiltott
Donor atom a $4j - 1$ -edik rácsponon	Akceptor atom a $4j$ -edik rácsponon

**6.4. ábra.** A Hamilton-operátor töltésátviteli tagjára általunk levezetett (6.6) és a [Ho, 1987]-ben felírt (6.11) összefüggések a fenti, négy-rácsponon periodicitású fázisfaktorok bevezetésével feleltethetők meg egymásnak.

[Ho, 1987]-ben szintén visszavezette a donor-akceptor modellt egy  $S = 1$ -es spinlánc vizsgálatára, azonban az átugrási tagra a mienktől (6.6) kissé eltérő formulát kaptak:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{CT} = & -\frac{1}{2}t \sum_{\text{összes}} S_i^z S_{i+1}^z (S_i^- S_{i+1}^+ + S_i^+ S_{i+1}^-) \\ & -\frac{1}{2}t \sum_{\text{összes}} (S_i^- S_{i+1}^+ + S_i^+ S_{i+1}^-) S_i^z S_{i+1}^z. \end{aligned} \quad (6.11)$$

E két összefüggés azonban nem lényegesen különböző, a 6.4. ábrán bemutatott négy-rácsponon periodicitású fázisfaktorok bevezetésével feleltethetők egymásnak.

**6.2. táblázat.** A félig töltött ionos Hubbard-modell összetartozó rácspontpárjainak energiája atomi közeli-  
tásban. A fázishatárok szűk környezetében  $U \approx \Delta$ , így a duplán betöltött páros és a betöltetlen páratlan  
rácspontok alkotta állapotpárok elhanyagolhatóak.

Páros rácspont	Páratlan rácspont	Energia	Állapot
$ \uparrow\downarrow\rangle$	$ 0\rangle$	$U + \Delta$	elhanyagolható
$ \uparrow\rangle ( \downarrow\rangle)$	$ \downarrow\rangle ( \uparrow\rangle)$	$\Delta/2 - \Delta/2$	nem elhanyagolható
$ 0\rangle$	$ \uparrow\downarrow\rangle$	$-\Delta + U$	nem elhanyagolható

Most pedig vizsgáljuk meg az ionos Hubbard-modellt! Aligia és Batista [Al, 2004]-ben megmutatta, hogy az ionos Hubbard-modellt is le lehet képezni egy  $S = 1$  effektív spinmo-  
dellbe. Az egyszerűsítés lényege a következő: amennyiben az elektronok és a rácspontok  
száma megegyezik a páros és páratlan rácspontok betöltöttsége erősen korrelált. A töltés-  
megmaradás következtében üres páratlan rácspont csak egy másik, duplán betöltött páros  
számú rácspont jelenlétében létezhet és hasonlóan egy üres páros rácspont egy duplán be-  
töltött páratlan rácspont létezését implikálja, azaz a probléma energiaspektrumát vizsgálva  
összetartozó rácspontpárokat kell tekintenünk. A 6.1. ábráról azt is leolvashatjuk, hogy a  
fázishatárok szűk környezetében, ahol  $U \approx \Delta$ , az egyszeresen betöltött páros és páratlan  
rácspontokból álló rácspontpár  $E = \Delta/2 - \Delta/2 = 0$  és a betöltetlen páros és kétszeresen  
betöltött páratlan rácspontokból álló rácspontpár  $E = 0 - \Delta + U \approx 0$  energiája megközeli-  
tőleg zérus, míg a kétszeresen betöltött páros és betöltetlen páratlan rácspontok energiája  
 $E = \Delta + U + 0 > 0$  véges, az előbbi két energiához képest nagy szám, így ez az álla-  
potpár válik elhanyagolhatóvá. Az egyszerűsítés után a rácspontonként megmaradt három  
elektronállapotot ismételtlen megfeleltethetjük  $S = 1$  spinállapotoknak. Az állapotpárok  
energiáit a 6.2. táblázatban foglaltuk össze, a leképezést pedig a 6.5. ábra definiálja.

$ 0\rangle \longrightarrow  0\rangle$	$ 0\rangle \longrightarrow$ tiltott
$ \uparrow\rangle \longrightarrow  1\rangle$	$ \uparrow\rangle \longrightarrow  1\rangle$
$ \downarrow\rangle \longrightarrow  -1\rangle$	$ \downarrow\rangle \longrightarrow  -1\rangle$
$ \uparrow\downarrow\rangle \longrightarrow$ tiltott	$ \uparrow\downarrow\rangle \longrightarrow  0\rangle$
Páros rácspontok	Páratlan rácspontok

**6.5. ábra.** Az ionos Hubbard-modell páros és páratlan rácspontjai elektronállapotainak leképezése  $S = 1$   
spinállapotokra.

Ha megköveteljük, hogy a fent bevezetett spinreprezentációban és az eredeti fermion-  
reprezentációban egyezzenek meg a mátrixelemek, akkor az alábbi Hamilton-operátorral

megadott effektív  $S = 1$  spinmodellhez jutunk:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_U + \mathcal{H}_\Delta \quad (6.12)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_t = & -\frac{1}{2}t \sum_{\text{összes}} S_i^z S_{i+1}^z (S_i^+ S_{i+1}^- - S_i^- S_{i+1}^+) \\ & + \frac{1}{2}t \sum_{\text{összes}} (S_i^+ S_{i+1}^- - S_i^- S_{i+1}^+) S_i^z S_{i+1}^z, \end{aligned} \quad (6.13)$$

$$\mathcal{H}_U = U \sum_{\text{összes}} (1 - (S_i^z)^2), \quad (6.14)$$

$$\mathcal{H}_\Delta = \frac{1}{2}\Delta \left[ \sum_{\text{páros}} (S_i^z)^2 - \sum_{\text{páratlan}} (2 - (S_i^z)^2) \right]. \quad (6.15)$$

Azonnal látszik, hogy az átugrási tag pontosan megegyezik a donor-akceptor modell esetében kapott (6.6) összefüggéssel. Ha ismételten figyelembe vesszük a töltésmegmaradást, akkor a (6.12) Hamilton-operátor atomi része,  $\mathcal{H}_U$  és  $\mathcal{H}_\Delta$  összevonható és egyszerűsítés után

$$\mathcal{H}_U + \mathcal{H}_\Delta = -\frac{\varepsilon}{2} \sum_i (S_i^z)^2 + \frac{N\varepsilon}{2} \quad (6.16)$$

alakba írható, ahol  $N$  a vizsgált lánc rácspontjainak száma,  $\varepsilon$ -t pedig az alábbi összefüggés definiálja:

$$\varepsilon = U - \Delta. \quad (6.17)$$

Láthatjuk, hogy az  $\frac{1}{2}N\varepsilon$  konstans energiaeltolástól eltekintve  $\mathcal{H}_U + \mathcal{H}_\Delta$  éppen megegyezik (6.10)-zel, a donor-akceptor modell atomjait leíró taggal, feltéve, ha megköveteljük az

$$\varepsilon = -(I - A) \quad (6.18)$$

egyenlőség teljesülését. Éppen ez a paraméter megfeleltetés teremti meg a kapcsolatot a donor-akceptor és az ionos Hubbard-modellek között. Végző soron arra az eredményre jutottunk, hogy a donor-akceptor modell csak az ionos Hubbard-modell, az intermolekuláris (legközelebbi szomszéd) Coulomb-csatolást is tartalmazó kiterjesztése. Az ionos Hubbard-modell páros rácspontjai donor, míg páratlan rácspontjai akceptor atomoknak felelnek meg.

Az egyetlen tisztázatlan kérdés az marad, hogy hogyan tudjuk magyarázni a fentiekben levezetett egyesített effektív  $S = 1$  spinmodell keretein belül a két modellben tapasztalt

eltérő fázisátalakulásokat? (Az ionos Hubbard-modell esetében két másodrendű fázisátalakulás  $\varepsilon > 0$ -nál, az ionos és semleges fázisokat egy dimerizált régió szeparálja, míg a donor-akceptor modell esetén direkt elsőrendű fázisátmenetet találunk  $\varepsilon < 0$ -nál.) A fejezet további részében erre a kérdésre keressük a választ, felrajzoljuk és értelmezzük az effektív spinmodellünk fázisdiagramját.

## 6.3. Indikátormennyiségek és pontosság

### 6.3.1. Energiagapok

A fázishatárokat legegyszerűbben az energiagapok csatolási állandók függvényében végzett vizsgálatával találhatjuk meg. Az energiagapokat több gerjesztett állapotból is származtathatjuk:

1.  $\Delta E_c$  az az energiamennyiség ami ahhoz szükséges, hogy egy elektront hozzáadjunk, vagy eltávolítsunk a rendszerből. Ha eredetileg azonos számú  $\uparrow$  és  $\downarrow$  spinű elektron volt a rendszerben, akkor az egyesített  $S = 1$  spinmodellben ezt a gapet az  $S_{\text{Tot}}^z = \pm 1$  és az  $S_{\text{Tot}}^z = 0$  spinszektorok legalacsonyabban fekvő energiaszintjei közötti különbség adja meg, azaz

$$\Delta E_c = E_0(S_{\text{Tot}}^z = 1) - E_0(S_{\text{Tot}}^z = 0), \quad (6.19)$$

amennyiben  $E_0(S_{\text{Tot}}^z)$  jelöli az  $S_{\text{Tot}}^z$  spinszektor legalacsonyabban fekvő energiaszintjét.

2.  $\Delta E_s$  a spin-flip gerjesztések energiagapja. A spinállapotok nyelvén ez a 2 és 0 teljes spinű szektorok legalacsonyabb energiaszintjei közötti különbség, azaz

$$\Delta E_s = E_0(S_{\text{Tot}}^z = 2) - E_0(S_{\text{Tot}}^z = 0). \quad (6.20)$$

3.  $\Delta E_{\text{CT}}$  az az energiamennyiség, ami ahhoz szükséges, hogy töltést vigyünk át egy donor atomról egy akceptor atomra, anélkül, hogy a teljes spint és töltést megváltoztatnánk. Az effektív spinmodellünkben ezt a gapet az  $S_{\text{Tot}}^z = 0$  spinszektor két legalacsonyabb energiaszintje közötti különbség, azaz

$$\Delta E_{\text{CT}} = E_1(S_{\text{Tot}}^z = 0) - E_0(S_{\text{Tot}}^z = 0) \quad (6.21)$$

definiálja. A töltésátviteli gap számolásánál figyelembe kell vennünk, hogy dimerizált alapállapot esetén nyitott határfeltétellel dolgozva, páros számú rácspontot tartalmazó láncok esetén a legalacsonyabban fekvő két szingulett állapotot véges energiagap szeparálja, így a korrek  $\Delta E_{CT}$  értéket csak periodikus határfeltétellel számolva határozhatjuk meg.

Vizsgálataink során a  $\Delta E_c$  töltés-, a  $\Delta E_s$  spin- és a  $\Delta E_{CT}$  töltésátviteli gapeket is meghatároztuk.

### 6.3.2. Ionicitás, dimer rendparaméter és rácspont-entrópiák

Természetesen megfelelően megválasztott rendparaméterek vizsgálatával is megtalálhatjuk a fázishatárokat. A semleges-ionos átalakulás esetében az ionicitás a kézenfekvő rendparaméter, de mivel dimerizált tartomány megjelenésére is számítunk, a dimer rendparamétert is érdemes meghatározni [Ma, 2004, Ho, 1987].

A  $\rho_i$  ionicitás az  $i$ -edik rácsponton ülő atom átlagos töltése, amit spinreprezentációban az  $(S_i^z)^2$  mennyiség várható értéke határoz meg:

$$\rho_i = \langle \Psi_{GS} | (S_i^z)^2 | \Psi_{GS} \rangle, \quad (6.22)$$

ahol  $|\Psi_{GS}\rangle$  az alapállapot hullámfüggvényét jelöli. Elsőrendű fázisátalakulás esetén az ionicitásnak ugrása van a fázisátalakulási pontban, míg másodrendű átalakulás esetén folytonos függvény, csupán a deriváltja válik végtelenné az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben. A gyakorlatban csak véges  $N$  számú rácspontot tartalmazó láncok vizsgálatából tudunk extrapolálni, így a fázisátalakulási pont helyzetére csak elsőrendű átalakulás esetén következtethetünk az ionicitás változásából.

A dimer rendparamétert, ahogyan az már 4.2.3. szakaszban előkerült, definiálhatjuk a szomszédos kötések közötti energiakülönbség várható értékeként (2.10), de tekinthetjük a kétrácspont-entrópia (3.10)-ben felírt dimerizációját is. Mi ez utóbbi lehetőséget választottuk.

A fázisátalakulási pontok felismerésében, a  $\rho$  ionicitás és a  $D_s$  dimer rendparaméter mellett, a 3. fejezetben elmondottak alapján a (3.1) egy-rácspont és a (3.9) kétrácspont-entrópiák vizsgálata is komoly segítséget jelent.

Számításainkat véges láncokon végeztük, a vizsgált mennyiségek  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben felvett értékeit a 2.4. szakaszban felírt extrapolációs formulák segítségével határoztuk meg.

### 6.3.3. Numerikus pontosság

Vizsgálatainkhoz a DMRG algoritmust alkalmaztuk, minden sajátállapotot külön-külön számoltunk. A dinamikus blokkállapot-kiválasztásnál<sup>5</sup> megköveteltük, hogy az egy renormálási lépés során bekövetkező kvantuminformáció-vesztesség ne haladja meg a  $\chi_{\max} = 10^{-8}$  értéket, a blokkállapotok száma pedig ne csökkenjen  $M_{\min} = 256$  alá. Ilyen feltételek mellett, nyitott határfeltételt alkalmazva  $M_{\max} = 300$  és  $800$  között változott a blokkállapotok maximális száma, míg periodikus határfeltétel esetén  $M_{\max} = 500 - 2000$  számú blokkállapottal kellett számolnunk.  $N_{\max}^{\text{nyitott}} = 800$  és  $N_{\max}^{\text{periodikus}} = 256$  rácpontot tartalmazott a leghosszabb vizsgált spinláncunk nyitott, illetve periodikus határfeltétel esetén. Az eljárás 2 vagy 3 sweep elvégzése után minden vizsgált paraméterérték mellett konvergált.

Periodikus határfeltétel mellett tudjuk, hogy a lokális mennyiségeknek, az  $s_i$  egyrácpont- és  $s_{i,i+1}$  kétrácpont-entrópiának, a  $\rho_i$  ionicitásnak és a  $D_i$  dimer rendnek függetlennek kell lenniük attól, hogy a gyűrű mely rácpontján számítjuk ki őket<sup>6</sup>. Annak érdekében, hogy pontosabb képet kapjunk számításaink numerikus pontosságáról  $\chi_{\max} = 10^{-6}$ ,  $M_{\min} = 256$  és  $N_{\max} = 256$  beállítás mellett egy kissé pontatlanabb, de gyorsabb próbaszámítást végeztünk:  $\left|s_i - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N s_j\right|$ ,  $\left|s_{i,i+1} - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N s_{j,j+1}\right|$ ,  $\left|\rho_i - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \rho_j\right|$  és  $\left|D_i - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N D_j\right|$  értékek bármely  $i \leq N$  rácpont esetében  $10^{-5}$ -nél kisebb értéket vettek fel.

## 6.4. Egyesített fázisdiagram

Vizsgálataink első lépéseként arra voltunk kíváncsiak, hogy a 6.2. szakaszban levezetett egyesített effektív  $S = 1$  spinmodellünk visszaadja-e  $\varepsilon > 0$  és  $V = 0$  esetben ez eredeti ionos Hubbard-modell másodrendű fázishatárait (6.4.1. szakasz). A következő lépés a másik,  $\varepsilon < 0$ ,  $t \ll V$  határeset – ami a donor-akceptor modell megfelelője – vizsgálata volt (6.4.2. szakasz). Végül, a 6.4.3. szakaszban kiterjesztettük számításainkat a  $\varepsilon/t \times V/t$  paramétersík köztes tartományaira, annak érdekében, hogy választ kapjunk 6.2. zárszavaként feltett kérdéseinkre, hogy megtudjuk, hogyan kapcsolható össze a rendszer határesetekben mutatott két fajta viselkedése.

<sup>5</sup>A fázishatárok közvetlen környezetében, ahol a kvantumállapotokat nagyfokú összefonódottság, a rendszert nagy korrelációs hossz jellemzi, kiemelten fontos a dinamikus blokkállapot-kiválasztás alkalmazása, ugyanis, rögzített számú blokkállapottal dolgozva könnyen torzulhatnak a rácpont-entrópia függvényeink a nem adaptív vágási procedúra miatt.

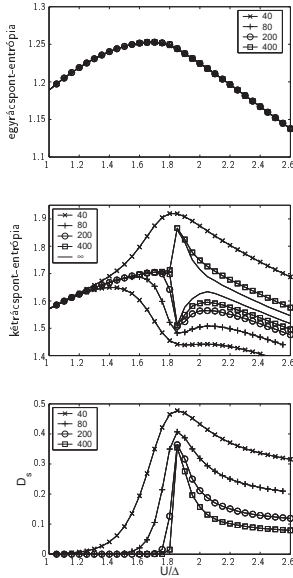
<sup>6</sup>Ezeket a mennyiségeket szokásosan a véges láncok közepén,  $i = N/2$ -nél számoljuk.



6.4.1.  $V = 0$ 

Ebben a szakaszban az a fő feladatunk, hogy megmutassuk, az egyesített spinmodellünk valóban ekvivalens az eredeti, (6.1) ionos Hubbard-moddal a megfelelő,  $V = 0$ ,  $\varepsilon > 0$  határesetben.

Tudjuk, hogy az ionos Hubbard-modellben két lépésben válik ionossá a semleges rendszer, az ionos és semleges fázisokat egy keskeny dimerizált tartomány szeparálja. Mindkét fázisátalakulás folytonos, de a második,  $U_{c2}$ -nél bekövetkező fázisátalakulás Berezinszkij–Kosterlitz–Thouless típusú. Korábban már láttuk, hogy ez rendkívüli módon megnéhezíti az energiagapok záródásának vizsgálatát. Éppen ezért mi az egyrácspon- és a kétrácspon-entrópiák  $U$  függésének viselkedéséből próbáltuk meghatározni a fázishatárokat.



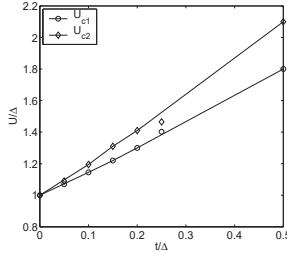
**6.6. ábra.** Az egyrácspon- és kétrácspon-entrópia, illetve a kétrácspon-entrópia dimerizációja  $U/\Delta$  függvényében ábrázolva ( $t/\Delta = 0,5$ ).

A 6.6. ábra  $t/\Delta = 0,5$ -nél mutatja a rácspon-entrópiák és a kétrácspon-entrópia dimerizációjának tipikus viselkedését<sup>7</sup>. Az egyrácspon-entrópia síma függvénye  $U$ -nak,

<sup>7</sup>Az ábrán az energiát  $\Delta$  egységekben ábrázoltuk.

megközelítőleg  $U/\Delta \approx 1.8$ -nál veszi fel az egyetlen maximumát, amit megfeleltethetünk az első  $U_{c1}$  fázisátalakulási pontnak. Ezzel szemben a kétrácpont-entrópia mindkét fázishatárt jelzi, két határozott lokális maximuma van. Ezek a maximumok a növekvő lánc hosszok mellett egyre közelebb kerülnek egymáshoz, de az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben is különálló csúcsok maradnak, lehetővé téve ezzel  $U_{c1}$  és  $U_{c2}$  meghatározását.

Ha vetünk egy pillantást a 6.6. ábra utolsó részábrájára azt is láthatjuk, hogy a kétrácpont-entrópia dimerizációja nagyon jó közelítéssel éppen  $U_{c1}$ -nek megfelelő  $U/\Delta \approx 1.8$  értéknél válik végessé, majd nagy  $U$ -ra exponenciálisan lecseng. A Berezinszkij–Kosterlitz–Thouless átalakulásnál tapasztalt rendkívül lassú konvergencia miatt  $U_{c2}$ -t nem tudjuk meghatározni, az viszont világosan látszik, hogy a semleges és – nagy  $U$  esetén – az ionos fázis reguláris és a várakozásunknak megfelelően a köztes tartományban dimerizálódik a rendszer.



**6.7. ábra.** Az ionos Hubbard-modell fázisdiagramja. A  $t/\Delta = 0,05$  és  $t/\Delta = 0,25$  kritikus érték [Ma, 2004]-ből származnak. Láthatjuk, hogy a Manmana és munkatársai által számolt kritikus  $U_{c1}$  és  $U_{c2}$  értékek jól illeszkednek a kétrácpont-entrópia maximumai által meghatározott fázishatárra.

A rácpont-entrópiák fenti analízisének különböző  $t/\Delta$  értékek melletti megismétlése rajzolja ki az ionos Hubbard-modell, 6.7. ábrán látható fázisdiagramját. Az  $U/\Delta \times t/\Delta$  síkon behúzott fázishatárok egyszersmind arra is lehetőséget adnak, hogy meghatározzuk mely paramétertartományban alkalmazható az effektív spinmodellünk. Ugyanis abban a tartományban tekinthető az  $\varepsilon/t = (U - \Delta)/t$  csatolási állandó<sup>8</sup> releváns paraméternek, ahol  $\varepsilon/t$  valóban állandó, azaz ahol  $(U/\Delta)_{c1}$  és  $(U/\Delta)_{c2}$  is lineárisan változik  $t/\Delta$  függvényében. Vizsgálataink azt mutatják, hogy  $t/\Delta < \frac{1}{2}$  esetén az  $(\frac{U}{\Delta})_{c1}(t/\Delta)$  és  $(\frac{U}{\Delta})_{c2}(t/\Delta)$  függvények

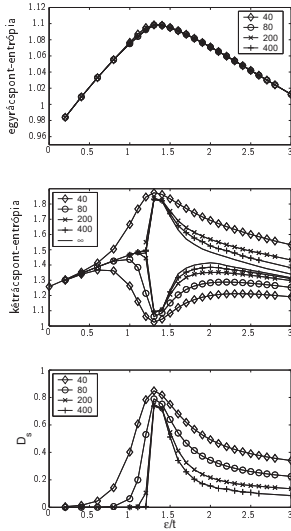
<sup>8</sup>Az effektív spinmodellben az energiát  $t$  egységekben mértük.

lineárisnak tekinthetők, a meredekségekre pedig az alábbi értékek adódnak:

$$(\varepsilon/t)_{c1} \approx 1.4 \quad [(\varepsilon/t)_{c1} = 1.4 \pm 0.04],$$

$$(\varepsilon/t)_{c2} \approx 2 \quad [(\varepsilon/t)_{c1} = 2 \pm 0.07].$$

Most pedig lássuk, visszakapjuk-e mindezeket az eredményeket az egyesített effektív  $S = 1$  spinmodellel számolva! A 6.8. ábra gyakorlatilag a 6.6. ábra megfelelője, amit az egyesített modellünkből kaptunk  $V = 0$ -val számolva az  $\varepsilon > 0$  intervallumon.



**6.8. ábra.** Az effektív  $S = 1$  spinmodellből  $V = 0$  mellett számolt egyráspont- és kétráspont-entropia, illetve a kétráspont-entropia dimerizációja  $\varepsilon/t = (U - \Delta)/t$  függvényében (a 6.6. ábra megfelelője).

Az entrópiagörbék vizsgálatával a következő megállapításokhoz juthatunk:

1. Az egyráspont-entropia, akárcsak az eredeti ionos Hubbard-modell vizsgálatánál, ismét csak egy fázishatárt jelez,  $(\varepsilon/t)_{c1} \approx 1.3$ -nál veszi fel a maximumát. A második, Berezinskij-Kosterlitz-Thouless típusú fázisátalakulásnak semmi jelét nem találjuk az egyráspont-entropia  $\varepsilon/t$  függvényében mutatott viselkedésében.

2. A kétrácpont-entrópia függvénynek most is két lokális maximuma van<sup>9</sup>, melyek termodinamikai határesetben az  $(\varepsilon/t)_{c1} \approx 1,3$  és  $(\varepsilon/t)_{c1} \approx 2$  kritikus értékeknél helyezkednek el. Mindez teljesen összhangban van az eredeti ionos Hubbard-moddal tapasztaltakkal és a [Tin]-ban és [Le, 2006]-ben közölt korábbi eredményekkel.
3. A kétrácpont-entrópia  $D_s$  dimerizációjából világosan látszik, hogy  $(\varepsilon/t)_{c1}$  felett spontán dimerizálódik a rendszer, majd  $\varepsilon/t$  nagy értékeire exponenciálisan lassan eltűnik a dimerizáció, de a dimerizált fázis  $(\varepsilon/t)_{c2}$  határának  $D_s(\varepsilon/t)$  dimerizációból történő meghatározásához ismételtelen kevésnek bizonyult számítási kapacitásunk.

### 6.4.2. Nagy negatív $\varepsilon/t$

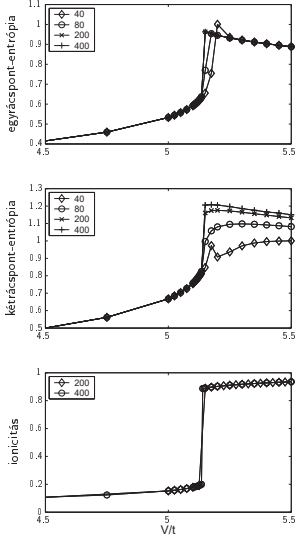
Ebben a határesetben  $\varepsilon < 0$  és a  $t$  átfedési integrál kicsi ( $V$ -hez és  $|\varepsilon|$ -hez képest), ez pedig a donor-akceptor modellnek megfelelő határeset. Arra vagyunk kíváncsiak, hogy a paraméterek fenti megválasztásával az effektív spinmodellünkől visszakapjuk-e a szakirodalomban [Gi, 1988, Ho, 1987] korábban közölt eredményeket.

Láttuk, hogy a  $t = 0$  atomi közelítésben a semleges-ionos átalakulás éppen  $V = \frac{1}{2}(I - A) = -\frac{1}{2}\varepsilon$ -nál következik be. Az átalakulás elsődendő, az ionicitás nulláról egyre ugrik, a gapek záródnak a fázishatáron, de nem folytonosan, mind a  $\Delta E_s$  spin-, a  $\Delta E_c$  töltés- és a  $\Delta E_{CT}$  töltésátviteli gapeknek ugrása van [Ho, 1987], a fázisátmenetet követően a töltésgap újra nyílik, a spin- és a töltésátviteli gapek értéke zérus marad. Az entrópiafüggvényeknek is ugrása van a fázishatáron, ugyanis semleges alapállapot esetén nincsenek kevert kvantumállapotok, a (3.1) egyrácpont- és a (3.9) kétrácpont-entrópiák értéke zérus, míg az ionos fázisban a rácpontokon ülő elektronok spinjének tetszőleges orientációja miatt az egyrácpont-entrópia értéke  $\ln 2$ , a kétrácpont-entrópia pedig az  $\ln 4$  értéket veszi fel. Most pedig lássuk, hogy  $t \neq 0$  esetén milyen eredményeket kaptunk az effektív spinmodellünk vizsgálatából!

Amikor az átugrási tag nem tűnt el, az ionicitás és a rácpont-entrópiák sem váltak zérussá a semleges fázisban. Azonban, az e szakaszban vizsgált kis  $t$  határesetben (nagy negatív  $\varepsilon/t$ ) a felsorolt mennyiségekben továbbra is véges ugrást kaptunk a fázisátalakulási pontban, amit  $V \approx -\varepsilon/2$ -nél kerestünk és  $V/t = 5,13$ -nál meg is találtunk. Eredményeinket a 6.9. ábra szemlélteti ( $\varepsilon/t = -10$ ).

---

<sup>9</sup>A második maximum kissé elmosódott, ennek azonban nem fizikai okai vannak: a  $(\varepsilon/t)_{c2}$  fázishatár közvetlen környezetében a dinamikus kiválasztott blokkállapotok száma elérte a maximális blokkállapot számot, amit numerikusan kezelni tudunk, így egy renormálási lépésben a kívánatos  $\chi_{\max}$  kvantuminformáció mennyiségnél nagyobb veszteséggel kellett számolnunk. Ennek ellenére a végesméret-skálázás nagyon



**6.9. ábra.** A láncok közepén számolt egyrácpont- és kétrácpont-entrópiák, valamint az ionicitás  $V/t$  függvényében ábrázolva  $\varepsilon/t = -10$ -nél, különböző hosszúságú láncok esetében.

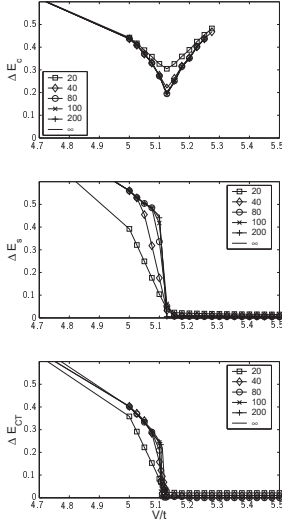
A 6.10. ábrán a periodikus határfeltétellel számolt  $\Delta E_s$  spin-, a  $\Delta E_c$  töltés- és a  $\Delta E_{CT}$  töltésátviteli gapok  $V/t$  függése látható szintén  $\varepsilon/t = -10$  mellett. Várakozásunk ellenére a töltésgap nem záródik, de minden véges  $N$  lánc hossz mellett és az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben is minimuma van  $V/t = 5,13$ -nál, pontosan ott, ahol az ionicitás és a rácpont-entrópiák ugranak. Ugyanennél a  $V/t$  értéknél a spin- és a töltésátviteli gapoknak is ugrása van, de ezek  $V/t > 5,13$  esetén zérussá válnak.

Természetesen a  $D_s$  dimer rendparaméter értékét is számoltuk, azonban az  $V/t$  bármely értékére már az  $N = 400$  rácpontot tartalmazó láncok esetén is  $10^{-3}$ -nál kisebb értéket vett fel, az  $N \rightarrow \infty$  extrapoláció pedig  $10^{-4}$ -nél is kisebb, eltűnő dimerizációt adott.

Mindaddig, amíg az  $\varepsilon/t < -8$  paramétertartományban vizsgáltunk, a fentiekhez hasonló eredményekre jutottunk. Az egyetlen különbség az volt, hogy a fázisátalakulási pont  $\varepsilon/t$  csökkenésével nagyobb  $V/t$  értékekbe tolódott. Mindezek alapján azt mondhatjuk, hogy nagy  $\varepsilon/t$  (vagy nagy  $V/t$ ) értékeknél, [Gi, 1988]-ben és [Ho, 1987]-ben közölt eredményeknek megfelelően, direkt, elsőrendű semleges-ionos átalakulást találunk.

---

pontosan visszaadta az eredeti ionos Hubbard-modellnél számolt  $(\varepsilon/t)_{c2} \approx 2$  értéket.

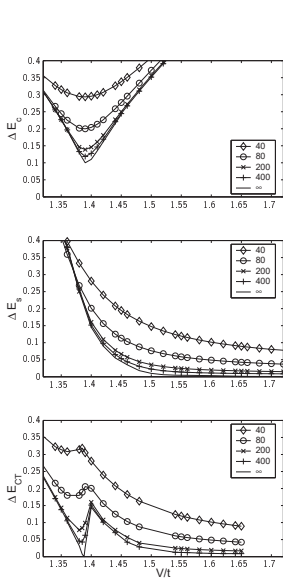


**6.10. ábra.** A periodikus határfeltétellel mellett számolt  $\Delta E_c$  töltésgap,  $\Delta E_s$  spingap és  $\Delta E_{CT}$  töltésátviteli gap véges átfedési integrál esetén ( $\varepsilon/t = -10$ ).

### 6.4.3. Kis $\varepsilon/t$

Most már láttuk, hogy az egyesített effektív  $S = 1$  spinmodellünkből megkaphatjuk az eredeti ionos Hubbard-modell két lépésben végbemenő, másodrendű, semleges-ionos átalakulását ( $V = 0$ ,  $\varepsilon/t > 0$ ) és a donor-akceptor modellben tapasztalt direkt, elsőrendű fázisátmenetet is ( $V \neq 0$ ,  $\varepsilon/t < -8$ ). A továbbiakban azt kell tisztáznunk, hogy mi történik a két határeset közötti paramétertartományban. Éppen ezért a 6.4.1. és a 6.4.2. szakaszokban bemutatott vizsgálatokat megismételtük az  $\varepsilon/t$  paraméter több, kis, pozitív értéke mellett. Vegyük most sorra hogyan viselkedtek indikátormennyiségeink, az energia-gapok, a rácspon-entrópiák, az ionicitás és a dimerizáció a  $V/t$  paraméter függvényében, milyen típusú és hány fázisátalakulást találtunk.

**Energiagapok** A 6.11. ábra a nyitott határfeltétellel,  $\varepsilon/t = -2$  paraméterértéknél számolt gerjesztési energiákat mutatja  $V/t$  függvényében. A gapok viselkedése nagyon hasonlít az eredeti ionos Hubbard-modellnél tapasztaltakhoz [Ma, 2004].

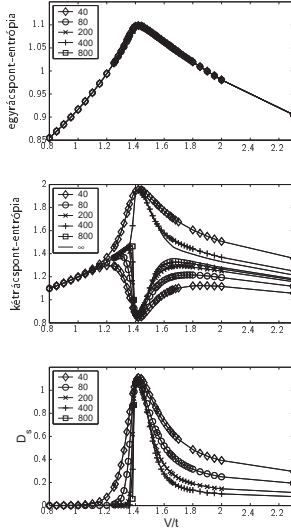


**6.11. ábra.** A  $\Delta E_c$  töltésgap, a  $\Delta E_s$  spingap és a  $\Delta E_{CT}$  töltésátviteli gap  $\varepsilon/t = -2$  esetén.

1. A  $\Delta E_{CT}$  töltésátviteli gap  $(V/t)_{c1} \approx 1.39$  kritikus értéknél tűnik el, majd azonnal újranílik, hogy egy másik  $V/t > (V/t)_{c1}$  értéknél, újra eltűnjön. Ez azonban csak a nyitott határfeltétellel végzett számolás eredménye<sup>10</sup>, periódikus határfeltételt alkalmazva a töltésátviteli gap nem nyílik újra.
2. Az  $N \rightarrow \infty$ -be extrapolált  $\Delta E_s$  spingap  $(V/t)_{c1}$ -nél véges értéket vesz fel, egy másik,  $(V/t)_{c2}$  kritikus értéknél záródik. Ezt a második  $(V/t)_{c2}$  kritikus értéket azonban a spingap rendkívül lassú záródása miatt nem tudtuk elfogadható pontossággal meghatározni a rendelkezésünkre álló számítási kapacitás mellett.
3. A  $\Delta E_c$  töltésgap, csakúgy mint az eredeti ionos Hubbard-modell esetében (6.4.1. szakasz) [Ma, 2004], minden véges  $N$  láncossznál egy minimumhellyel rendelkező, véges függvénye  $V/t$ -nek. Termodinamikai határesetben ez a minimumhely az első kritikus értékhez,  $(V/t)_{c1} \approx 1.39$ -hez tart.

<sup>10</sup>Látni fogjuk, hogy  $(V/t) > (V/t)_{c1}$  esetén a rendszer spontán dimerizálódik, gap nyílik a két legalacsonyabb fekvő energiaszint között. Éppen ezért, már a 6.4.1. szakaszban jeleztük, hogy a  $\Delta E_{CT}$  töltésátviteli gapet csak periódikus határfeltétellel mellett határozhatjuk meg.

**Ionicitás** Számításaink során folytonos ionicitásgörbét kaptunk  $V/t$  függvényében, ami másodrendű fázisátalakulásra enged következtetni, azonban nem teszi lehetővé a fázisátalakulási pont meghatározását.



**6.12. ábra.** A láncok közepén számolt egyrácpont- és kétrácpont-entrópiák, valamint a kétrácpont-entrópia dimerizációja  $\varepsilon/t = -2$  esetén.

**Dimerizáció** A dimer rendparaméter  $V/t$  függése nagyon hasonlít az eredeti ionos Hubbard-modellnél tapasztaltakhoz (6.12. ábra utolsó részábra).  $V/t < (V/t)_{c1}$  esetén a dimerizáció eltűnik ( $\approx 10^{-5} - 10^{-4}$ ), reguláris az alapállapot. A rendszer  $(V/t)_{c1} \approx 1,39$ -nél válik dimerizálttá, majd  $V/t$  nagy értékeire ismét eltűnik a dimer rend. Sajnos még az  $N_{\max} = 800$  rácspontot tartalmazó láncok vizsgálata sem volt elegendő ahhoz, hogy elfogadható pontossággal meghatározhassuk  $(V/t)_{c2}$  termodinamikai határesetben felvett értékét, így e téren a kétrácpont-entrópia profilra hagytuk ismételt.

**Rácspont-entrópiák** Az egyrácpont-entrópiának (6.12. ábra első részábra) egy viszonylag éles maximuma jelzi, hogy  $(V/t)_{c1} \approx 1,4$ -nél másodrendű fázisátalakulás történik.

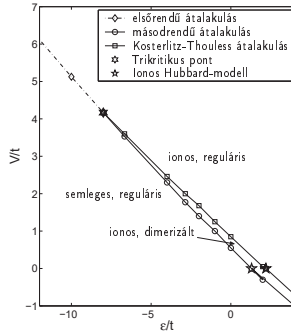


A kétrácpont-entrópiának (6.12. ábra második részára) ezzel szemben két lokális maximuma van: az első, éles maximuma  $V/t \approx 1,39$ -nél, ami az egyrácpont-entrópia álltal jelzett  $(V/t)_{c1}$ -nek felel meg és egy kevésbé éles  $(V/t)_{c2} \approx 1,66$ -nál, amit a dimerizált fázis határaként azonosthatunk. Az  $N_{\max} = 800$  rácpontot tartalmazó láncokon végzett számítások megerősítették, hogy a  $(V/t)_{c1}$ -nél talált éles maximum valóban maximum és nincsen ugrása a kétrácpont-entrópiának, ennek megfelelően mindkét fázishatár esetében másodrendű az átalakulás.

Az  $\varepsilon/t > -2$  eset kapcsán bemutatottakhoz hasonló eredményeket (két egymást követő másodrendű fázisátalakulás) kaptunk más,  $\varepsilon/t > -8$  paraméterértékekkel számolva is. A különbség csupán annyi volt, hogy növekvő  $\varepsilon/t$  értékek mellett egyre kisebb kritikus  $V/t$  értékeket találtunk.<sup>11</sup>

#### 6.4.4. Fázisátalakulások $\varepsilon/t$ és $V/t$ függvényében

Minden eddigi eredményünket az alábbi, 6.13. ábrán bemutatott fázisdiagramban foglalhatjuk össze.



**6.13. ábra.** Az ionos Hubbard- és a donor-akceptor modelleket egyesítő effektív  $S = 1$  spinmodell fázisdiagramja a  $\varepsilon/t \times V/t$  paramétersíkon ábrázolva. Az elsőrendű fázisátalakulást szaggatott, a másodrendű és Berezinskij–Kosterlitz–Thouless típusú átalakulásokat folytonos vonal jelzi. A trikritikus pontot csillag jelöli, míg az eredeti ionos Hubbard-modell fázis határait egy másik típusú csillaggal jelöltük.

Mint kiderült az ionos Hubbard-modell két, folytonos fázisátmenete és a donor-akceptor modell elsőrendű fázisátalakulása az egyesített effektív  $S = 1$  spinmodellünk két határ-

<sup>11</sup>  $\varepsilon/t > (\varepsilon/t)_{c1}$  vagy  $\varepsilon/t > (\varepsilon/t)_{c2}$  esetén az első, illetve mindkét kritikus  $V/t$  értéke negatívvá válik.

eseteként megkapható. Amikor  $\varepsilon < 0$  és  $|\varepsilon| \gg t$  a semleges-ionos átalakulás elsőrendű, az ionicitásnak véges ugrása van a fázishatáron. Megközelítőleg az  $\varepsilon/t \times V/t$  paramétertartomány ( $\varepsilon/t \approx -8$ ,  $V/t \approx 4.2$ ) pontjában egy trikritikus pontot találunk,  $\varepsilon/t > -8$  esetén két lépésben zajlik le a semleges-ionos átmenet, mindkét fázisátalakulás másodrendű. A  $\Delta E_{CT}$  gap az első fázisátalakulási pontban záródik, míg a  $\Delta E_s$  spingap a második átalakulásnál tűnik el. A dimer rendparaméter csak a két folytonos fázisátalakulás közötti szűk tartományban véges, máshol az alapállapot reguláris. Összesen három fázist különböztethetünk meg:

1. a semleges, reguláris fázist,
2. az ionos reguláris fázist és
3. az ionos dimerizált tartományt.

A fázisdiagrammon (6.13. ábra) az eredeti ionos Hubbard-modell fázis határai a  $V/t = 0$  egyenesre esnek (a modell a molekulák közötti  $V$  Coulomb-kölcsönhatást nem veszi figyelembe). Fabrizio-ék [Fa, 2000] eredményeinek megfelelően a fázisátalakulás két lépésben zajlik le, a semleges és ionos állapotokat egy ionos dimerizált fázis választja el.

## 6.5. A semleges-ionos átalakulás egyesített modellje és fázisdiagramja

A DMRG algoritmust alkalmazva vizsgáltuk a semleges-ionos átalakulás egydimenziós modelljeit. Először megmutattuk, hogy levezethető egy egyesített effektív  $S = 1$  spinmodell, amely egyenértékű a donor-akceptor modellel abban az esetben, amikor a molekulák közötti  $V$  Coulomb-taszítás a legnagyobb energia a probléma energiaskáláján,  $\Delta/t \gg 1$  esetén pedig megfelel az eredeti ionos Hubbard-moddnek.

Számításainkat ezen az egyesített modellen végeztük. Meghatároztuk a gapeket (spin, töltés és töltésátviteli), az ionicitást, a rácspont-entrópiákat és a dimer rendparaméter értékét különböző véges hosszúságú láncok esetében. A termodinamikai határeset extrapolálásához  $N_{\max} = 800$  rácspontot tartalmazó láncokat is használtunk. Kiderült, hogy a kétrácspont-entrópia tanulmányozása a legcélravezetőbb, ez a mennyiség jelzi a legpontosabban a fázishatárokat, még olyankor is, mikor a nagyon is véges számítási kapacitásunk következtében a gapek záródásából nem tudunk következtetni a kritikus csatolásiállandó

értékekre. A kétrácpont-entrópiák vizsgálatával meghatároztuk az egyesített modell fázisdiagramját az atomok közötti Coulomb kölcsönhatás és az atomot jellemző energia kombináció függvényében. Eredményeink összhangban voltak a korábbi vizsgálatok eredményével és feloldották az ionos Hubbard- és a donor-akceptor modellek viselkedése között látszólag fennálló ellentmondást.

Ebből a fejezetből a spin-, töltés- és töltésátviteli gapak, az egyesített spinmodell csatlakozási állandóinak függvényében történő meghatározása tekinthető önálló munkának, valamint a semleges-ionos fázishatár meghatározása az energiagapok vizsgálatából.



## 7. fejezet

# Az elektron-fonon csatolás szerepe a semleges-ionos átalakulásban

Doktori munkám utolsó lépéseként az elektron-fonon csatolás, az előző, 6. fejezetben bemutatott, semleges-ionos átalakulásban betöltött szerepét vizsgáltuk meg.

A nyolcvanas évek végén a semleges-ionos átalakulás szerves töltésátviteli sókban végzett kísérleti vizsgálata során [To, 1987, To, 1989, Ao, 1997, Br, 1992, Gi, 1993] nyilvánvalóvá vált, hogy a semleges-ionos és a reguláris-dimerizált átalakulások között szoros kapcsolat van, így a szomszédos rácspontok közötti Coulomb-kölcsönhatás mellett az elektron-fonon kölcsönhatást is figyelembe kell venni a jelenség modellezésénél.

A következő, 7.1. szakaszban át fogjuk tekinteni a fenti felismeréshez vezető kísérleti eredményeket és a semleges-ionos átalakulást az elektron-fonon csatolás figyelembevételével vizsgáló elméleti munkákat, melyekből megismerhetjük az elektron-fonon kölcsönhatás adiabatikus közelítésben történő figyelembevételét is, amit alkalmazni is fogunk vizsgálataink során.

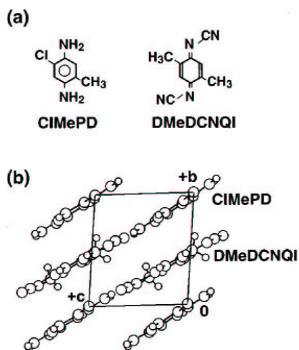
A numerikus számítás menetét ezt követően, a 7.2. szakaszban, a megszokottól talán egy kicsit részletesebben fogjuk bemutatni. Ennek az az oka, hogy, bár alap gondolatát tekintve egyszerű, mégis ez a legkomplexebb a dolgozatban szereplő számítások közül. Ez a fejezet teljes egészében saját eredményeket tartalmaz

Ki fogunk térni a fázishatárok megkeresésénél alkalmazott módszerre (7.2.1. szakasz) és arra is, hogyan dönthető el a fázisátmenet rendje (7.2.2. szakasz), majd a számoláshoz használt DMRG algoritmus paraméterezése (7.2.3. szakasz) következik. A 7.2.4. és a 7.2.5. szakasz az alapállapot energiája és az ionicitás extrapolációjának kérdésével foglalkozik. A 7.3. szakaszban numerikus számításaink eredményét mutatjuk be, a konklúzióhoz pedig

az utolsó, az 7.4. szakaszban jutunk el. Az elektron-fonon csatolás vizsgálatát nagyrészt önállóan végeztem.

## 7.1. Ismert eredmények, az elektron-fonon csatolás adiabatus közelítésben

A semleges-ionos átalakulás irodalmát az előző fejezetben már megismertük, megmutattuk a szakirodalomban elterjedt modellek közötti kapcsolatot és felrajzoltuk az átalakulás fázis-diagramját is, így, ahelyett, hogy ismétlésekbe bocsátkoznánk, most csak az elektron-fonon kölcsönhatással kapcsolatos eredményeket tekintjük át.



**7.1. ábra.** (a) CIMEPD és DMeDCNQI molekulaszerkezet, (b) CIMEPD-DMeDCNQI kristálystruktúra. Forrás: S. Aoki and T. Nakayama, Phys. Rev. B **56**, 2893 (1997).

változásának függvényében.

A hőmérsékletet  $T = 300$  K-ről  $T = 100$  K-re csökkentve a CIMEPD-DMeDCNQI komplexnél az ionicitás  $\rho = 0.3$ -ról folytonosan növekszik a  $\rho = 0.6$  értékre, miközben a semleges-ionos tartományok határát jelentő  $T = 200$  K foknál megjelenik a dimer rend

<sup>1</sup>A dimerizáció egyben a donor és akceptor molekulák közötti távolság alternációját, azaz az inverziós szimmetria sérülését is jelenti.

Horovitz és Schaub javasolta az első elektron-fonon kölcsönhatást figyelembe vevő modellt [Ho, 1983] a semleges-ionos átalakulás vizsgálata során, ez a modell azonban még nem foglalkozott a Coulomb kölcsönhatás szerepével, azonban így is magyarázatot adott a Raman- és infravörös-abszorpciós kísérleteknél [Gi, 1983, Ho, 1986, Gi, 1982] mért fononspektrumban megjelenő normál módusokra.<sup>1</sup>

A nyolcvanas évek közepe óta végzett kísérleti vizsgálatok során a különböző szerkesztésű sók esetében másodrendű, mint például a CIMEPD-DMeDCNQI komplex esetében [To, 1987, To, 1989] és elsőrendű (TTF-CA, TMB-TCNQ) [Ao, 1997, Br, 1992, Gi, 1993] semleges-ionos átalakulásokat is tapasztaltak a nyomás, illetve a hőmérséklet

a rendszerben. TTF-CA esetében a nyomást növelve  $p \approx 9$  kbar-nál válik dimerizálttá a rendszer, de  $p \approx 11$  kbar nyomáson végbemegy egy újabb átalakulás, melyet a 6.4.4. szakaszban megismerthez hasonló struktúrájú fázisdiagrammal fogunk tudni értelmezni. Amennyiben a hőmérséklet függvényében figyeljük az átalakulást  $T = 81$  K foknál  $\Delta\rho = 0.3$  ugrást találunk a molekulák átlagos töltésében, az ionicitásban. TMB-TCNQ esetén ez az ugrás  $\Delta\rho = 0.1$ .

E vizsgálatokban az volt a közös pont, hogy az ionicitás végessé válásával párhuzamosan dimerizálttá is vált a rendszer. Azaz a kísérletek alapján úgy tűnik, hogy a semleges-ionos és a reguláris-dimerizált átalakulások között szoros kapcsolat van, így a szomszédos rácspontok közötti Coulomb-kölcsönhatás mellett az elektron-fonon kölcsönhatást is figyelembe kell venni, ha pontosan meg akarjuk érteni a jelenséget.

E felismerés több elméleti munka megjelenéséhez vezetett [Av, 1986, Sc, 1983, Gi, 1988, So, 1985, Na, 1986, Ta, 1986]. Avignon és munkatársai valós térbeli renormalizációcsoport-módszert alkalmazva [Av, 1986], Girlando és Painelli pedig a diagrammatikus vegyértékkötés-módszerrel [Gi, 1988] vizsgálták a dimerizált és reguláris fázisok stabilitását. Megmutatták, hogy a semleges fázis kevésbé hajlamos a dimerizációra, de bizonyos paraméter-beállítások esetén a semleges-ionos fázishatár közelében mindkét tartományban megjelenhet a dimer rend. Horovitz és Schaub [Sc, 1983]-ban hasonló eredményre jutottak.

Mi azt tűztük ki célul, hogy e munkák összefoglalása és általánosításaként, az elektron-fonon kölcsönhatás figyelembevételével újrarajzoljuk a semleges-ionos átalakulás fázisdiagramját a probléma szempontjából releváns összes paraméter függvényében.

A 6.2. szakaszban megmutattuk, hogy a semleges-ionos átalakulást leíró modelleket, a donor-akceptor és az ionos Hubbard-modellt a

$$\mathcal{H}^{\text{NI}} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 \quad (7.1)$$

Hamilton-operátorral megadott effektív  $S = 1$  spinmodellben foglalhatjuk össze, ahol

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{1}{2}t \sum_i S_i^z (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \quad (7.2)$$

$$-\frac{1}{2}t \sum_i (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) S_{i+1}^z \quad (7.3)$$

a töltésátviteli tagnak felel meg,

$$\mathcal{H}_2 = -\frac{1}{2}\varepsilon \sum_i (S_i^z)^2 \quad (7.4)$$

a molekulán belüli kölcsönhatásokat írja le, míg

$$\mathcal{H}_3 = -V \sum_i (S_i^z)^2 (S_{i+1}^z)^2 \quad (7.5)$$

a szomszédos molekulák közötti Coulomb-kölcsönhatásért felelős.  $S_i^+$  és  $S_i^-$  jelöli a spin-vetület növelő és csökkentő operátorokat,  $S_i^z$  a spin  $z$  irányú vetületét méri,  $t$  (átfedési integrál),  $\varepsilon$  (atomon belüli energia) és  $V$  (elszomszéd Coulomb-vonzás) pedig a csatolásiállandók. Mostani vizsgálatunknál is ebből a Hamilton-operátorból indultunk ki.

Az elektron-fonon kölcsönhatás szerepét [Ho, 1987] alapján vehetjük figyelembe. Adiabtikus közelítést alkalmazva ( $\hbar\nu_{\text{fonon}} \ll \Delta E_{\text{CT}}$ ) a  $t$  átfedési integrált, valamint a  $V$  Coulomb-vonzást az alábbi módon, a dimerizált alapállapotnak megfelelően kell modulálnunk:

$$t \rightarrow (1 \pm \delta)t, \quad (7.6)$$

$$V \rightarrow (1 \pm \alpha\delta). \quad (7.7)$$

$\delta$  jelöli a molekulák relatív elmozdulását,  $\alpha$  pedig egy arányossági tényező.

Vizsgálataink során mi először a molekulák transzverzális elmozdulásának megfelelő  $\alpha = 0$  esettel<sup>2</sup> foglalkoztunk, majd megnéztük, hogy egy véges,  $\alpha = \frac{1}{2}$  értéknél hogyan módosulnak eredményeink.

A lánc torzulásából adódó  $E_{\text{elasztikus}}$ elasztikus energiát klasszikusan vettük figyelembe ( $E_{\text{elasztikus}} = \frac{1}{2}K\delta^2$ , ahol a  $K$  paraméter méri a lánc merevségét). Mindezek alapján az elektron-fonon csatolás hatása az alábbi Hamilton-operátor alkalmazásával építhető be (7.1)-be:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{modulált}}^{NI} + \frac{1}{2}K\delta^2, \quad (7.8)$$

ahol  $\mathcal{H}_{\text{modulált}}^{NI}$  jelöli a (7.6) és (7.7) alapján modulált (7.1) Hamilton-operátort.

---

<sup>2</sup>A molekulák transzverzális elmozdulása esetén az átfedési integrál változása jóval nagyobb, mint a Coulomb-csatolásban bekövetkező változás.



## 7.2. Az alkalmazott numerikus eljárás

A 6. fejezetben megmutattuk, hogy a semleges-ionos átalakulás leírására bevezetett ionos Hubbard- és donor-akceptor modellek összefoglalhatóak egy közös effektív  $S = 1$  spinmodellben, majd meghatároztuk az egyesített modell fázisdiagramját. Ez a fázisdiagram az abszolút merev lánchoz, a  $K \rightarrow \infty$  határesethez tartozik. A 6.13. ábrán látható, hogy ebben a határesetben a trikritikus pont eléréséig direkt, elsőrendű átalakulással válik ionossá a semleges fázis. A trikritikus pont alatt két lépésben megy végbe az átalakulás, mindkét átmenet folytonos, a semleges és ionos fázisokat egy szűk dimerizált tartomány szeparálja.

A kísérleti eredmények azonban azt mutatják, hogy az ionicitás végessé válásával párhuzamosan megjelenik a dimerizáció is és az ionos fázisban már nem válik a rendszer ismét regulárisrá. A donor-akceptor modell ionos fázisa, a  $t$  átfedési integrál kis értékeinél leképezhető antiferromágneses  $S = 1/2$  Heisenberg-lánccá, így, amíg érvényes a leképezés, a spin-Peierls-átalakulás során végbemenő spontán dimerizációval magyarázhatjuk a kísérleteket. Továbbra is kérdéses azonban, hogy mi történik az átfedési integrál nagyobb értékeinél.

Éppen ezt a kérdést szeretnénk megválaszolni a semleges-ionos átalakulás modelljeit egyesítő effektív  $S = 1$  spinmodell keretei között. Feltételezhetjük, hogy az elektron-fonon kölcsönhatást figyelmen kívül hagyva is spontán dimerizálódott tartomány határai tolódnak el a lánc fellágyulásával ( $K$  csökkenésével), így számításainkat a dimerizált tartomány határai mentén végeztük az  $\varepsilon/t \times V/t$  paraméterterben. A fejezet további részeiben a numerikus eljárás részleteit mutatom be.

### 7.2.1. A dimerizált fázis határai

A számítás első lépéseként meghatároztuk a paramétersík egy adott  $(\varepsilon/t, V/t)$  pontjában a DMRG algoritmust alkalmazva a (7.8) Hamilton-operátor  $\mathcal{H}_{\text{modulált}}^{\text{NI}}$  tagjának legkisebb, az alapállapothoz tartozó  $E$  energiasajátértékét a  $\delta$  moduláció függvényében, ezt a függvényt a továbbiakban  $E(\delta)$ -val fogjuk jelölni. Ilyen módon minden véges lánc hossz esetén egy monoton csökkenő  $E(\delta)$  energi moduláció-függvényt kapunk, mely a Landau-elmélet alapján a  $\delta \approx 0$  környezetében kvadratikusan indul.<sup>3</sup> Természetesen a lánc torzulásából

<sup>3</sup>Nyitott határfeltétel esetén ezt a parabolikus viselkedést csak akkor vesszük észre, ha  $E(\delta)$ -t a  $\delta < 0$  tartományban (a dimerizált molekula párosokra ...DA-DA... helyett ...AD-AD... párokként gondolunk) is ábrázoljuk, ugyanis a parabola egy  $\delta < 0$  pontban veszi fel szélsőértékét. A lánc hossz növelésével tolódik el a parabola minimuma  $\delta = 0$ -ba. Ugyanezt tapasztaltuk spin-Peierls-átalakulás esetében is, mely az  $S = 1$  spinmodellünkben vizsgált reguláris-dimerizált átalakulás  $S = 1/2$  megfelelőjének tekinthető.

adódó  $E_{\text{elasztikus}} = \frac{1}{2}K\delta^2$  klasszikus rugalmas energiát is figyelembe kell vennünk, így (7.8) alapján a teljes alapállapot energiát az  $E_{\text{GS}} = E + E_{\text{elasztikus}}$  összefüggés adja meg.

Azonnal látszik, hogy  $E$  és  $E_{\text{elasztikus}}$  viszonya a döntő az alapállapot dimerizáltságának kérdésében, akárcsak a spin-Peierls-átalakulás esetében. Cross és Fisher az  $S = 1/2$  izotrop Heisenberg-láncot tanulmányozva megmutatták, hogy termodinamikai határesetben a felösszegződő kvantumfluktuációk elrontják az energia véges láncok esetén kapott parabolikusan induló moduláció függését,  $E(\delta) \sim \delta^{\frac{4}{3}}$  [Cr, 1979], azaz semilyen  $K$  érték mellett nem tudja kiegyenlíteni a deformálódott rács mágneses kicserélődési kölcsönhatásból származó energia nyereségét a deformációs energia veszteség. Ez azt jelenti, hogy a rács merevségétől függetlenül spontán dimerizálódik a rendszer.  $S > 1/2$  spinek esetén, azonban ez nem feltétlenül van így. Látni fogjuk, hogy a semleges-ionos átalakulás egyesített modelljében sem jelenik meg a 6.13. fázisdiagramon már feltüntetetten kívül újabb spontán dimerizált tartomány.

A következőképpen gondolkodhatunk: amennyiben a vizsgált lánc  $K$  merevsége elegendően nagy, akkor az  $E_{\text{elasztikus}} = \frac{1}{2}K\delta^2$  rugalmas energia kompenzálja  $E(\delta)$  csökkenését, az  $E_{\text{GS}}$  alapállapot energiája monoton nő a  $\delta$  moduláció függvényében, így  $\delta = 0$  jelenti az energia minimumot, ami értelemszerűen a nem dimerizált alapállapotnak felel meg. Ellenkező esetben, amikor  $K$  értéke kicsi, az  $E_{\text{GS}} = E + E_{\text{elasztikus}}$  mennyiség kezdetben csökkenő függvénye lesz  $\delta$ -nak, persze a moduláció nagy értékeire, az  $E_{\text{GS}}(\delta)$  függvény ismételt monoton növekszik. Mindez azt jelenti, hogy egy  $\delta \neq 0$  véges moduláció értéknél veszi fel az  $E_{\text{GS}}$  alapállapot energiája a minimumát, azaz a rendszer dimerizált.

Mindezek alapján a reguláris-dimerizált fázishatárt jelentő kritikus  $K_{\text{crit}}$  lánc merevséget közvetlenül meghatározhatjuk  $K$  adaptív változtatásával, miközben nyomon követjük az  $E_{\text{GS}}(\delta)$  alapállapot energiája minimumhelyének változását, de eljárhatunk ennél hatékonyabban is: a  $K_{\text{crit}}$  értéket leolvashatjuk közvetlenül a kvadratikusan induló  $E(\delta)$  kezdeti görbületéből is. Mi ez utóbbi lehetőséget választottuk, az eljárás menetét az alábbi pontokban foglalhatjuk össze:

1. Meghatározzuk  $\mathcal{H}_{\text{modulált}}^{\text{NI}}$  legkisebb,  $E$  energia-sajátértékét a  $\delta$  moduláció függvényében a DMRG algoritmust alkalmazva.
2.  $E$  a  $\delta$  moduláció kvadratikusan induló, monoton csökkenő függvénye. Következő feladatunk annak az intervallumnak a meghatározása a  $\delta$  tengelyen, ahol az  $E(\delta)$  energia-moduláció függvény parabolikus viselkedést mutat.
3. Amennyiben nem találunk ilyen tartományt, az a rendszer spontán dimerizációjára

utal,  $E$  négyzetesnél gyorsabban csökken bármely  $\delta \leq 0$  pontban, így nem létezik olyan véges  $K$  merevségű lánc, melynél a rács torzulásából adódó, parabolikusan növekvő rugalmas energia kompenzálni tudná a monoton csökkenő  $E(\delta)$  függvényt,  $K_{\text{crit}} \rightarrow \infty$ , az alapállapot tetszőleges  $K$  mellett dimerizált (pl. a 6.13. ábra spontán dimerizált tartományában: 7.7. ábra).

4. Miután meghatároztuk, hogy mely  $\delta$  intervallumon kvadrátikus az  $E(\delta)$  energia-moduláció függvény a legkisebb négyzetek módszerével illesszük az adatpontjainkra az  $a + b\delta^2$  egyenletű parabolát. Most a következő, 7.2.2. szakaszban elmondottak alapján eldönthetjük, hogy első-, vagy másodrendű fázisátalakulással állunk szemben.
5. Ha a lánc  $K$  merevségét éppen  $K_{\text{crit}} = -2b$ -re válasszuk, akkor  $\delta \approx 0$  esetén  $E_{\text{elasztikus}} = \frac{1}{2}K\delta^2$  éppen kompenzálja  $E(\delta)$  csökkenését. Tetszőleges  $K > K_{\text{crit}} = -2b$  merevségű lánc esetében az  $E_{\text{GS}} = E + E_{\text{elasztikus}}$  alapállapot energiája függvény kezdeti szakasza növekvő, amennyiben folytonos az átalakulás ez  $\delta > 0$  esetén sem lesz más-képp (lásd 7.2.2. szakasz). Azaz pontosan  $K_{\text{crit}} = -2b$  jelenti azt a kritikus merevség értéket, ahol a csökkenő  $E_{\text{GS}}$  függvény monoton növekvővé, a reguláris alapállapot pedig energetikailag a dimerizálnál kedvezőbbé válik.
6. Elsőrendű átalakulás esetén  $E_{\text{GS}}(\delta)$  nem kezd azonnal monoton nőni  $K > -2b$  esetén, egy lokális maximum ékelődik a minimum hely és a  $\delta = 0$  pont közé (lásd részletesen a 7.2.2. szakaszban) és csak egy  $K_{\text{crit}} > -2b$  kritikus értéknél ugrik az alapállapot energiája minimumhelye a nem dimerizált állapotot jelentő  $\delta = 0$  pontba. Ebben az esetben  $K$  értékének  $-2b$ -ről induló további, adaptív növelésével határozhatjuk meg a lánc  $K_{\text{crit}}$  kritikus merevségét (az a  $K$  érték, ami  $E_{\text{GS}}$ -t  $\delta$  éppen pozitív függvényévé teszi). Vizsgálataink során nem találtunk egyetlen  $(\varepsilon/t, V/t)$  pontban sem elsőrendű átalakulást (7.8. és 7.12. ábra).

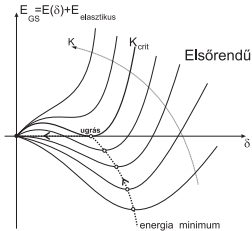
A most megismert számítási lépéseket ismételve a  $\varepsilon/t \times V/t$  paramétersík valamennyi pontjához meghatározhatjuk a lánc kritikus  $K_{\text{crit}}$  merevségének értékét és így újra rajzolhatjuk a semleges-ionos átalakulás dimerizált fázisának határait  $K$  függvényében.

### 7.2.2. A fázisátalakulás rendje

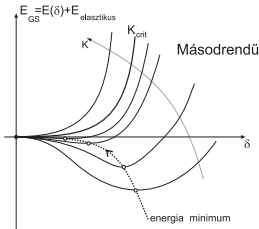
Az előző szakaszban láttuk, hogy az  $E(\delta)$  energia-moduláció függvény  $\delta \approx 0$  tartományban mutatott viselkedése meghatározó volt az alapállapot dimerizációjának vizsgálata során. A

reguláris-dimerizált fázisátmenet rendjét viszont éppen  $E(\delta)$  nagy  $\delta$  moduláció értékeknél megfigyelhető lefutása határozza meg.

Láttuk, hogy megválaszthatjuk úgy a lánc  $K$  merevségét ( $K = -2b$ ), hogy a rugalmas energia éppen kiegyenlítse  $E(\delta)$  négyzetes csökkenését  $\delta \approx 0$  esetén. Amennyiben  $E(\delta) - E(0)$  mennyiség abszolút értékben meghaladja az  $\frac{1}{2}K_{\text{crit}}\delta^2$  rugalmas energiát<sup>4</sup> az  $E_{\text{GS}} = E + E_{\text{elasztikus}}$  alapállapotú energia, annak ellenére, hogy a  $\delta \approx 0$  tartományban zérus meredekséggel indul, továbbra is a  $\delta$  moduláció monoton csökkenő függvénye marad. Mindez azt jelenti, hogy  $K = -2b + \epsilon$  merevségű lánc esetén  $E_{\text{GS}}$  meredeksége pozitívvá válik  $\delta = 0$ -ban, míg az alapállapotú energia minimumhelye továbbra is egy  $\delta \neq 0$  véges modulációértéknél lesz, azaz egy lokális maximum jelenik meg az  $E_{\text{GS}}(\delta)$  függvényben a minimumhely és a  $\delta = 0$  pont között. A 7.2. ábra első részábráján jól nyomon követhető, hogy tovább növelve  $K$ -t az energiaminimumot jelentő  $\delta$  moduláció éppen az említett lokális maximum alatti intervallumot átugorva válik zérussá a fázisátalakulási pontban, azaz az átalakulás elsőrendű.



**7.2. ábra.** Első- és másodrendű reguláris-dimerizált fázisátalakulások vázlatos ábrázolása. A lánc  $K$  merevségének növekedését vékony nyilazott vonal mutatja, a vastag szaggatott vonal az  $E_{\text{GS}}$  alapállapotú energia  $K$  függvényében felvett minimumhelyeit köti össze. A lánc  $K_{\text{crit}}$  kritikus merevségéhez tartozó  $E_{\text{GS}}(\delta)$  görbét pedig vastag folytonos vonallal jelöltük. • reguláris, míg o dimerizált alapállapotot jelöl.



<sup>4</sup>Ezt az eset akkor áll elő, ha az  $E(\delta)$  adatpontokra illesztett  $a + b\delta^2$  parabola az illesztési intervallumon kívülre eső, nagy  $\delta$  értékek esetén az  $E(\delta)$  görbe felett fut. Szemléletesen ez azt jelenti, hogy  $K = -2b$  esetén a lánc torzulásából adódó rugalmasenergia-vesztesség még kisebb, mint az alapállapot dimerizációjából adódó energianyereség, a rendszer energiaminimumát véges  $\delta$  moduláció jellemzi.

Az imént ismertetettekkel ellentétes esetben, amikor  $E(\delta) - E(0)$  mennyiség abszolút értékben kisebb, mint az  $\frac{1}{2}K_{\text{crit}}\delta^2$  rugalmas energia  $\delta$  tetszőleges értéke mellett, akkor az  $E_{\text{GS}} = E + E_{\text{elasztikus}}$  alapállapotú energia ismételten zérus meredekséggel indul  $K = -2b$  esetén, de ezúttal már monoton növekvő függvénye a  $\delta$  modulációnak. A 7.2. ábra második részábráján láthatjuk, hogy ebben az esetben a lánc  $K_{\text{crit}} = -2b$  kritikus merevségét tetszőleges értékkel csökkentve negatív, míg tetszőleges értékkel növelve pozitív meredekséggel indul az  $E_{\text{GS}}$  görbe,  $\delta \neq 0$ -ban, illetve  $\delta = 0$ -ban felvett minimumhelyekkel, azaz az átalakulás folytonos.

Az első- és másodrendű fázisátalakulások ilyen formán történő megkülönböztetése gyakorlati oldalról nem jelent mást, mint az  $E(\delta)$  görbe kezdő intervallumára illesztett parabola és az adatpontok viszonyának összehasonlítását. Amennyiben az adatpontok a parabola felett fekszenek az illesztési intervallumon kívül az átalakulás folytonos lesz, ellenkező esetben megjelenik egy lokális maximum az  $E_{\text{GS}}(\delta)$  függvényben  $K \approx K_{\text{crit}}$  esetén, ez pedig elsőrendű átalakulást eredményez.

### 7.2.3. A numerikus pontosság

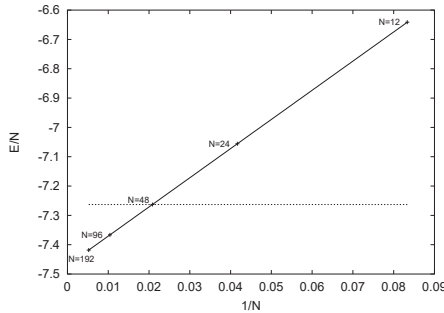
Számításainkhoz ismételten a DMRG algoritmust használtuk. A sajátállapotokat külön-külön számoltuk, nyitott és periodikus határfeltételeket is alkalmaztunk, a végesméret-skálázást a nyitott határfeltétellel számolt adatpontokkal végeztük el. A dinamikus blokkállapot-kiválasztásnál megköveteltük, hogy az egy renormálási lépés során bekövetkező kvantuminformáció-vesztés ne haladja meg a  $\chi_{\text{max}} = 10^{-7}$  értéket, a blokkállapotok száma pedig ne csökkenjen  $M_{\text{min}} = 64$  alá. Ilyen feltételek mellett  $M_{\text{max}} = 64$  és 256 változott a blokkállapotok maximális száma. A leghosszabb vizsgált láncunk  $N_{\text{max}} = 192$  rácspontot tartalmazott. Kezdetben három sweepet végeztünk, de az energia-sajátértékek pontossága csak a hatodik tizedesjegyben módosult a sweepelés során, azt tapasztaltuk, hogy egy sweep elvégzése után az eljárás minden paraméterérték mellett konvergált. Számításaink pontosságát  $10^{-5}$ -nek fogadhatjuk el.

### 7.2.4. Alapállapotí energia

Az alapállapotí energiát<sup>5</sup> véges,  $N = 12, 24, 48, 96, 192$  rácspontot tartalmazó láncokon, nyitott határfeltétel mellett számoltuk ki, majd az így kapott eredményekből az

$$E/N(N) = a + b/N + c/N^2 \quad (7.9)$$

összefüggés szerint extrapoláltuk az energia  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetben felvett értékét.



**7.3. ábra.** A  $\mathcal{H}_{\text{modulált}}^N$  operátor legkisebb  $E$  energia sajátértékének skálázódása a lánc hossz reciprokának függvényében az  $\varepsilon/t = 5, 2$ ,  $V/t = 10$  pontban ( $\delta = 10^{-2}$ ).

Az extrapoláció eredményét a 7.3. ábrán szemléltetjük, amin az  $E$  alapállapotí energia  $1/N$  függvényében mutatott tipikus viselkedése látható. A legkisebb négyzetek módszerével elvégzett illesztés ( $N_{\text{max}} = 192$ ) a következő eredményre vezetett:  $a = -7,4701446(8)$ ,  $b = 9,9447053(5)$ ,  $c = 0,0067(6)$ . A négyzetes eltérés pedig  $\kappa = 10^{-6}$  volt, ami egy nagyságrenddel kisebb, mint a DMRG algoritmussal számolt adatpontjaink pontossága ( $10^{-5}$ ), ráadásul jól látszik az ábrán, hogy (7.9)  $1/N$ -ben lineáris tagja dominál. Éppen ezért megismételtük az illesztést úgy, hogy a leghosszabb láncunk is csak  $N_{\text{max}} = 48$  rácspontot tartalmazott:  $a = -7,4701413$ ,  $b = 9,9448519$ , illetve  $c = 0,0054$ .

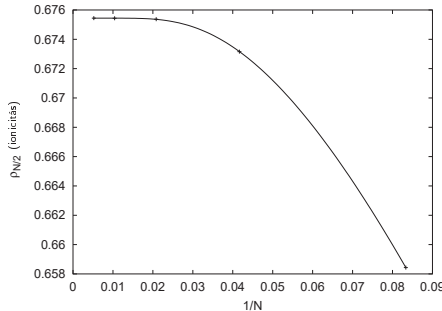
Ha kiszámítjuk a két illesztés eredményei közötti eltérést láthatjuk, hogy az egy rácspontra eső alapállapotí energia csak a hatodik tizedesjegyben tér el, ez pedig azt jelenti,

<sup>5</sup>Itt most a (7.8) Hamilton-operátor  $\mathcal{H}_{\text{modulált}}^N$  tagjának alapállapotáról van szó, ahogyan az a jelölésből is látszik. Ebben a fejezetben végig  $\mathcal{H}_{\text{modulált}}^N$   $E$ -vel jelölt alapállapotí energiájáról van szó, anélkül, hogy ezt a továbbiakban külön hangsúlyoznánk.

hogy  $10^{-5}$  pontossággal számolt  $E$  alapállapotú energia és 5, illetve 6 tizedesjegyre pontos végesméret-extrapoláció mellett az  $N = 48$  rácspontonál hosszabb láncok vizsgálatát nem várhatjuk a pontosság érdemi javulását. Mindazonáltal a dimerizált fázis határainak meghatározásakor mi  $N_{\max} = 96$  rácspontot tartalmazó rendszereken számolt energiákat is felhasználtunk a végesméret-extrapoláció során.

### 7.2.5. Ionicitás

Mivel a semleges-ionos átalakulás vizsgálata a célunk természetesen nyomon követtük az ionicitás változását is az  $\varepsilon/t \times V/t$  paramétersíkon. Az ionicitást mint rendparamétert az 6.3.2. szakaszban már definiáltuk a molekulák átlagos töltéseként, amit a spinreprezentációban (6.22) ad meg. Most csak emlékeztetünk, hogy elsőrendű átalakulás esetében az ionicitás ugrik a fázishatáron, folytonos átalakulásnál azonban az ionicitás is folytonos függvénye a csatolási állandóknak, csupán a termodinamikai határesetben vett deriváltja válik végtelenné, így másodrendű fázishatárok lokalizálására nem ez a mennyiség a legmegfelelőbb. Mi is pusztán eredményeink ellenőrzésének, megerősítésének céljából számoltuk.



**7.4. ábra.** A  $\rho$  ionicitás skálázódása a lánc hossz reciprokának függvényében az  $\varepsilon/t = -1$  és  $V/t = 1$  pontban ( $\alpha = 0$ ,  $K = 10$ ).

Az ionicitás lokális mennyiség, így a (2.15) skálafüggvénnyel extrapolálhatjuk az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai határesetet. A legkisebb négyzetek módszerét alkalmazó illesztés eredményét a 7.4. ábra szemlélteti. Jól látható, hogy az ionicitás a lánc hossz növekedésével gyorsan konvergál. Az illesztés során a  $\beta$  exponensre minden esetben egy egyhez nagyon közeli érték adódott ( $\beta = 1 \pm 0.3$ ) így  $\beta$ -t egynek választottuk,  $\beta := 1$ , a

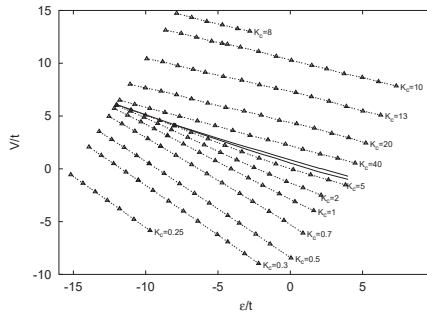
végisméret-extrapoláció során, ezzel egy nagyságrendet javítottunk az illesztés pontosságán:  $\rho_0 = 0.675440(5)$ ,  $d = -0.761(3)$ ,  $\xi = 4.56(1)$ . A négyzetes eltérés  $\kappa = 1.3 \cdot 10^{-5}$ -nek adódott, így azt mondhatjuk, hogy a  $\rho$  ionicitás végisméret-extrapolációjának pontossága nagyságrendileg  $10^{-5}$  volt.

### 7.3. Fázishatárok az elektron-fonon csatolás jelenlétében

A 7.2. szakaszban bemutatott numerikus eljárást alkalmazva az elektron-fonon kölcsönhatás figyelembevételével meghatároztuk a semleges-ionos átalakulás fázisdiagramját  $\alpha = 0$  és  $\alpha = \frac{1}{2}$  esetén.

#### 7.3.1. $\alpha = 0$

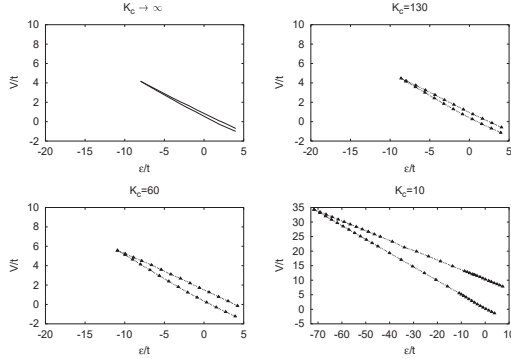
Először a molekulák transzverzális elmozdulásának megfelelő  $\alpha = 0$  esettel foglalkoztunk. A 7.5. és a 7.6. ábrákon a dimerizált tartomány fázishatárai láthatóak a lánc  $K$  merevségének függvényében az  $\varepsilon/t \times V/t$  paramétersíkon ábrázolva. Összehasonlításul vastag



**7.5. ábra.** A dimerizált fázis határai különböző  $K$  merevségű láncok esetén. A vastag vonallal ábrázoltuk az elektron-fonon csatolás figyelmen kívül hagyásával kapott fázishatárokat ( $K \rightarrow \infty$ ), míg az 6. fejezetben meghatározott trikritikus pontot  $\bullet$  jelöli.

vonallal berajzoltuk a 6. fejezetben meghatározott és a 6.13. ábrán bemutatott fázishatárokat is. Jól látható, hogy  $K$  értékét növelve kezdetben gyorsan, majd egyre lassuló ütemben keskenyedek a dimerizált régió, és nagy  $K$  határesetben éppen az 6. fejezet fázishatárait



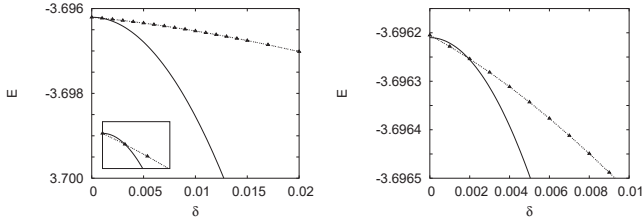


**7.6. ábra.** A trikritikus pont elmozdulása a lánc  $K$  merevségének függvényében. Jól látható, hogy a dimerizált tartomány mindvégig zárt marad, nem szélesedik sávvá.

kapjuk vissza. Ez a megfigyelés egyezésben van azzal, hogy a 6.13. ábra, elektron-fonon csatolást figyelmen kívül hagyó fázisdiagramja éppen a  $K \rightarrow \infty$  határesethez tartozik és  $K$  csökkenésével, a lánc lágyulásával a 6.13. ábra spontán dimerizálódott tartományának határai szélesednek ki.

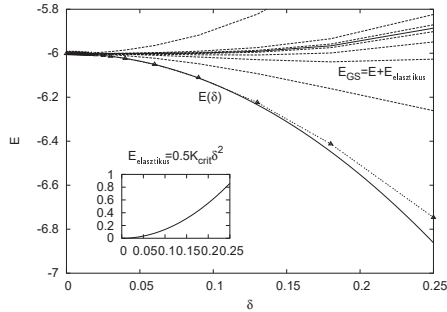
Szembevetendő, hogy ez a kiszélesedés asszimmetrikus. A semleges oldalon lassan csökkenő  $E(\delta)$  energiamoduláció-függvényt kapunk, ami, ahogyan azt a 7.5. fázisdiagramon is láthatjuk, már kis merevségű rácsok esetén is reguláris alapállapotot eredményez. A spontán dimerizálódott tartományhoz közeledve  $K_{\text{crit}}$  egy nagyon szűk tartományban válik végtelenné. Ezzel szemben az ionos fázisban  $E(\delta)$  meredeken csökken a moduláció értékét növelve, így a spontán dimerizált tartománytól távol is csak nagyon merev rácsok esetén marad reguláris a rendszer és  $K_{\text{crit}}$  is csak lassan csökken a semleges-ionos fázishatártól távolodva. A kísérletek során ez az asszimmetria jelenik meg úgy, mintha a semleges-ionos átalakulás egyben reguláris-dimerizált átmenet is lenne.

Arra, hogy a 7.5. ábrán vastag vonallal berajzolt tartományon belül tetszőleges  $K$  érték mellett dimerizált a rendszer alapállapota, a 7.7. ábra a legjobb bizonyíték. A 7.7. ábra ebben a tartományban mutatja az  $E(\delta)$  energiamoduláció-függvény viselkedését. Jól látható, hogy nincsen olyan  $\delta$  intervallum, ahol  $E(\delta)$  parabolikusan viselkedik,  $\delta \approx 0$  esetén  $E(\delta)$  parabolikusnál gyorsabban csökkenő függvénye a modulációnak, így a négyzetesen növekvő  $E_{\text{elasztikus}} = \frac{1}{2}K\delta^2$  rugalmas energia csak  $K \rightarrow \infty$  határesetben kompenzálhatja azt, így a 7.2.1-ben elmondottak alapján spontán dimerizálódik az alapállapot.



**7.7. ábra.** Az  $E(\delta)$  energia-moduláció függvény a spontán dimerizált tartomány egy pontjában ( $\varepsilon/t = -0.85$ ,  $V/t = 4$ ). Az adatpontokra illesztett  $a + b\delta^2$  egyenletű parabolát folytonos vonal jelöli (a baloldali részárbrán az első két, míg a jobb oldalin az első három adatpontra illesztettünk). Jól látszik, hogy  $E(\delta)$  nem kvadratikusan indul.

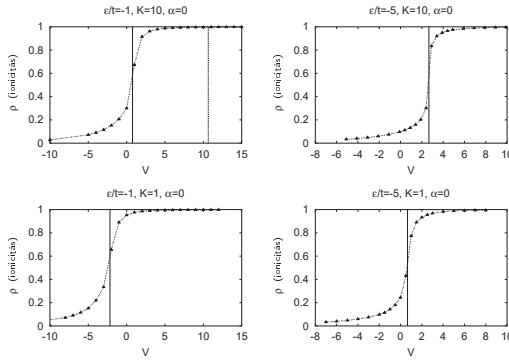
A 7.5. és a 7.6. ábrákon azt is észrevehetjük, hogy  $K$  értékét változtatva a fázisdiagram struktúrája változatlan marad, csupán a trikritikus pont mozdul el. A dimerizált tartomány továbbra is zárt marad és nem szélesedik ki az ionos és semleges tartományokat elválasztó sávva.



**7.8. ábra.** Az  $E$  (pontozott vonal),  $E_{\text{elasztikus}}$  (subplot) és az  $E_{\text{GS}}$  (vastag folytonos vonal  $K = K_{\text{crit}}$  esetén és vékony szaggatott vonal a  $K = K_{\text{crit}} - 4.5$ ,  $K_{\text{crit}} - 2$ ,  $K_{\text{crit}} - 1/2$ ,  $K_{\text{crit}} + 1/2$ ,  $K_{\text{crit}} + 2$  és  $K_{\text{crit}} + 20$  görbék esetén) energiák tipikus viselkedése a  $\delta$  moduláció függvényében a  $\varepsilon/t = -5.7$ ,  $V/t = 2.7$  pontban. Az  $E(\delta)$  görbe kezdeti szakaszára illesztett parabolát vékony folytonos vonal jelzi.

A 7.8. ábra az  $E(\delta)$  energiamoduláció-függvény mellett az  $E_{\text{elasztikus}}$  rugalmas energia és az  $E_{\text{GS}} = E + E_{\text{elasztikus}}$  alapállapotú energia  $\delta$  függését is mutatja. Jól látható, hogy  $\delta \approx 0$  esetén  $E$  négyzetesen csökkenő függvénye a  $\delta$  modulációnak. Ezt a csökkenést a parabolikusan növekvő  $E_{\text{elasztikus}}$  rugalmas energia éppen kompenzálja  $K_{\text{crit}}$  merevségű lánc

esetén.  $\delta$  nagyobb értékeire  $E(\delta)$  csökkenése négyzetesnél lassabbá válik, így  $K > K_{\text{crit}}$  esetén az  $E_{\text{GS}} = E + E_{\text{elasztikus}}$  alapállapotú energia szigorúan monoton növekvő függvénye lesz a  $\delta$  modulációnak, így a 7.2.2. szakaszban foglaltak alapján a reguláris-dimerizált fázisátmenet másodrendű. Az energiák 7.8. ábrán bemutatott viselkedése jellemzi a teljes paramétertartományt  $K$  értékétől függetlenül, azaz a fázisátalakulások továbbra is folytonosak tetszőleges  $K$  esetén, mindaddig, amíg a trikritikus pont alatt maradunk. A 7.8. ábrán az  $E_{\text{GS}}$  alapállapotú energia néhány  $K \neq K_{\text{crit}}$  esetén is be van rajzolva, így nyomon követhetjük a dimerizáció folytonos megszűnését.



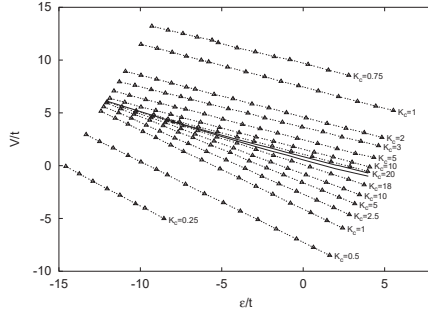
**7.9. ábra.** Az ionitász görbe változása  $V/t$  függvényébe  $\varepsilon/t = -1$ -nél és  $\varepsilon/t = -5$ -nél ( $\alpha = 0$ ). A reguláris semlege, dimerizált ionos fázishatárt folytonos, a dimerizált ionos, reguláris ionos fázishatárt (nem látszik minden ábrán) pedig szaggatott vonal jelzi.

A 7.9. ábrán az ionitász változását követhetjük nyomon az  $\varepsilon/t \times V/t$  paramétersík  $\varepsilon/t = \text{const}$  vonalai mentén. Láthatjuk, hogy az ionitász a fázishatár egy szűk környezetében válik végessé, majd nő az ionos fázist jellemző 1 értékhez, de mindvégig egyértelműen folytonos marad, a fázisátalakulás másodrendű. A dimerizált tartomány a várakozásoknak megfelelően ionos.

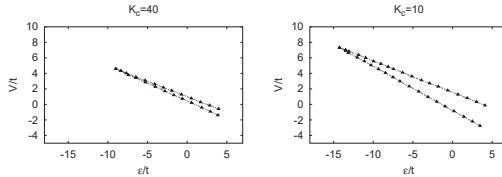
### 7.3.2. $\alpha = 1/2$

Az előző, 7.3.1. szakaszban elvégzett vizsgálatokat megismételtük  $\alpha = \frac{1}{2}$  esetén is. A 7.10. és a 7.11. ábrákon láthatjuk  $K$  függvényében a dimerizált tartomány határait. Jól látható, hogy a fázisdiagram struktúrája alapvetően megegyezik az  $\alpha = 0$  esetben

találattal, csupán a dimerizált tartomány szélessége és a trikritikus pont eltolódásának mértéke különböző a két paraméterérték mellett.



7.10. ábra. A 7.5. ábra megfelelője az  $\alpha = 1/2$  esetben.

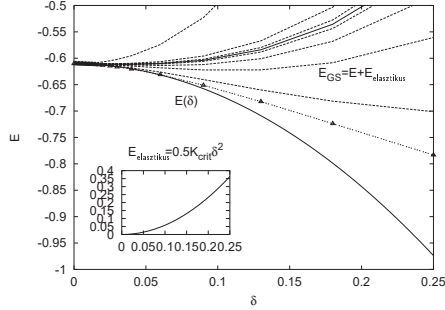


7.11. ábra. A 7.6. ábra megfelelője az  $\alpha = 1/2$  esetben.

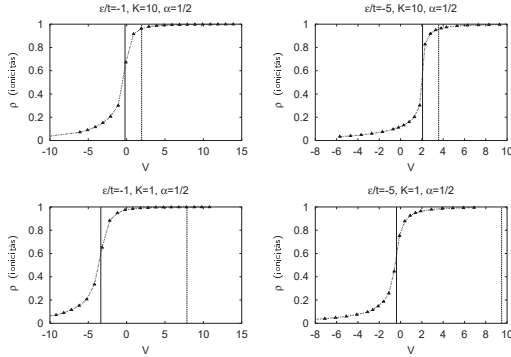
Az energiák és az ionicitás tipikus viselkedését a 7.12. és 7.13. ábrákon követhetjük nyomon. Látható, hogy a görbék kvalitatíve nem különböznek az  $\alpha = 0$  eset megfelelő görbétől. Összességében azt mondhatjuk, hogy az  $\alpha$  arányossági tényező végesnek választása nem okoz strukturális változást az  $\alpha = 0$  esethez képest.

## 7.4. Fázisdiagram

A DMRG algoritmust alkalmazva, adiabatikus közelítésben vizsgáltuk az elektron-fonon kölcsönhatás szerepét a semleges-ionos átalakulás során. Megmutattuk, hogy a lánc  $K$



7.12. ábra. A 7.8. ábra  $K = K_{\text{crit}} - 9$  görbével kiegészített megfelelője az  $\alpha = 1/2$  esetben.



7.13. ábra. A 7.9. ábra megfelelője az  $\alpha = 1/2$  esetben.

merevségének függvényében eltolódnak a 6. fejezetben felrajzolt, a  $K \rightarrow \infty$  határesethez tartozó fázishatárok. Jelentősen kiszélesedik a dimerizált tartomány, ezért jelenik meg a mérési eredményekben úgy, mintha a semleges-ionos átalakulás egyben reguláris-dimerizált átmenet is lenne. Vizsgálataink szerint az elektron-fonon csatolás figyelembevétele nem változtatja meg a fázisátmenetek rendjét, továbbra is három fázist azonosíthatunk: a reguláris semleges, a dimerizált ionos és a reguláris ionos fázisokat, a fázisdiagram struktúrája változatlan marad, pusztán a fázishatárok mozdulnak el a lánc lágyulásával.



## 8. fejezet

# Összefoglalás

Doktori munkám során egydimenziós kvantumrendszerekkel foglalkoztam. Három, egymástól jól elkülönülő problémakör képezi a dolgozat témáját, melyeket a 2. fejezetben bemutatott numerikus módszer, a DMRG algoritmus alkalmazása szorosan összeköt. Mindhárom problémakör esetén a modellek fázisátalakulásaira voltunk kíváncsiak, így a megfelelő indikátormennyiségek (energiagapok, rácpont-entrópiák és rendparaméterek) csatlóásiállandó-függésének meghatározása volt az első feladat, hogy ezt követően a 3. fejezetben bemutatott módszerekkel megkeressük a fázisátalakulási pontokat és meghatározzuk a fázisátalakulások rendjét.

Munkámat a bilineáris-biquadratikuss  $S = 1$  spinlánc vizsgálatával kezdtem. A DMRG módszer elsajátítása mellett részt vettem a Chubukov [Ch, 1990] által felvetett spinnematikus fázis, illetve a Läuchli és munkatársai [Lä, 2003] által javasolt kritikus tartomány keresésében a modell ferromágneses és dimerizált fázisai között. Az energiagapet és a dimerizációt számoltuk a DMRG algoritmussal, miközben kiemelt figyelmet fordítottunk a numerikus pontosság kérdésére.

A megfelelő indikátormennyiség kiválasztását követően segédkeztem a dimerizáció meghatározásában, amit a dimerizált tartomány belsejéből indulva, egészen a ferromágneses fázis határáig, a  $\theta$  paraméter függvényében számoltunk. Az eredmények azt mutatták, hogy a dimer rendparaméter exponenciálisan lassan tűnik el  $\theta = -3\pi/4$ -nél, pontosan úgy, ahogyan az a Berezinskij–Kosterlitz–Thouless típusú átalakulásnál tapasztalható.

Nem dimerizált tartománynak semmi nyoma nem mutatkozott a ferromágneses fázishatár szomszédságában az irodalomban említett  $\theta = -0,67\pi$  paraméterértéknél. A numerikus számítások pontossága azonban nem tette lehetővé egyértelmű állítás megfogalmazását. A dimer rendparaméter  $\theta$  és  $1/N$  függvényében mutatott viselkedése azonban mégis a kere-

sett köztes fázis hiányára engedett következtetni. Ha mégis létezik ez a fázis akkor annak a  $-0,75\pi < \theta < -0,7\pi$  intervallumban kell lennie. Az viszont bizonyos, hogy e vitatott fázis, létezése esetén, a fázisdiagram sokkal keskenyebb tartományát foglalja el, mint ahogyan azt Läuchli-ék gondolták.

A bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  modell vizsgálatából az alábbi tézispontba foglaltak tekinthetők saját eredménynek:

1. A bilineáris-bikvadratikus  $S = 1$  modell, egzaktul megoldható  $\theta = -\pi/2$  pontját vizsgálva megmutattam, hogy lokális mennyiségek, mint az általunk is számolt  $D$  dimer rendparaméter skálázódása sokkal pontosabb lehetőséget biztosít a fázishatárok azonosításához, mint az energiagap.

Doktori munkám második lépéseként az egydimenziós  $SU(n)$  ( $n = 2, 3, 4$  és  $5$ ) Hubbard-modelleket vizsgáltam két speciális,  $1/2$  és  $1/n$  betöltöttség mellett. Az alapállapot dimerizációjának és a modellbeli Mott-átmenethez tartozó kritikus Coulomb-taszítás értékének meghatározása volt a vizsgálatok célja. Ennek megfelelően a spin- és töltésgapok, valamint az egyrácspon-, kétrácspon-entrópiákat és a kétrácspon-entrópia dimerizációja került meghatározásra az  $U$  Coulomb-csatolás függvényében. A numerikus számításokhoz a DMRG algoritmust alkalmaztam, amit az egzaktul számolható  $SU(2)$  Hubbard-moddellen teszteltük.

Az energiagapok vizsgálata megerősítette, hogy a félig töltött  $SU(n)$  Hubbard-modellek esetében mind a töltés-, mind a spingap végesek a Coulomb-taszítás tetszőleges értékénél és mindkét gap exponenciálisan lassan nyílik, ami  $U_c = 0$ -nál végbemenő, Berezinskij–Kosterlitz–Thouless típusú fázisátalakulásra enged következtetni. A spin és a töltés szabadsági fokok csatolódását pedig az umklapp folyamatok relevánssá válásával magyarázhatjuk. Az  $U$  Coulomb-taszítás függvényében meghatározott dimer rendparaméter értékek pedig megerősítették azt a [Ma, 1989]-ban megfogalmazott feltevést is, miszerint páros  $n$  értékeknél dimerizálttá válik a rendszer alapállapota és megmutatták, hogy ez páratlan  $n$ -ek esetén is így van, azaz a rendszer páros és páratlan  $n$ -eknél tapasztalt viselkedés nem különbözik, mindkét esetben dimerizált az alapállapot.

Az  $1/n$  betöltöttségű  $SU(n)$  Hubbard-modellek esetében megmutattuk, hogy az  $1/3$  betöltöttségű  $SU(3)$ , az  $1/4$  betöltöttségű  $SU(4)$  és az  $1/5$  betöltöttségű  $SU(5)$  modellek viselkedése nem különbözik a félig töltött  $SU(2)$  modellnél tapasztaltaktól. A rendszer alapállapota nem dimerizált, a spingap zérus, a töltés gap pedig exponenciálisan lassan nyílik  $U > 0$  esetén. A kritikus  $U_c$ -re azonban a [As, 1999]-ben megadottnál jóval kisebb



értéket kaptunk, számításaink pontosságát szem előtt tartva ebből zérus kritikus Coulomb-taszításnál végbemenő Mott-átmenetre következtettünk. Ezt az eredményt az egyrácpont- és kétrácpont-entrópia függvények vizsgálata is megerősítette, így azt biztosan állíthatjuk, hogy a Mott-átalakulás a [As, 1999]-ben szereplő kritikus Coulomb-csatolásnál jóval kisebb  $U_c$ -nél megy végbe,  $U_c$  valószínűleg 0.

Az egydimenziós  $SU(n)$  ( $n = 2, 3, 4$  és  $5$ ) Hubbard-modellek vizsgálatából az alábbi tézispontba foglaltak tekinthetők saját eredménynek:

2. A gap nyílását numerikusan vizsgálva kimutattam, hogy a Coulomb-taszítás kritikus  $U_c$  értéke  $1/n$  betöltöttségű modellek esetén jóval az irodalomban [As, 1999] szereplő érték alatt van. Numerikus számításaim pontosságát figyelembe véve, azonban nem zárható ki a véges, de kicsi  $U_c < 0,1$  lehetősége sem, mégis arra a következtetésre jutottam, hogy eredményeim  $U_c = 0$ -nál végbemenő Berezinszkij–Kosterlitz–Thouless típusú fázisátalakulásra utalnak.

Az utolsó problémakör, amivel doktori munkám során találkoztam a semleges-ionos átalakulás kérdése. Először a jelenséget magyarázó két korábbi modell, az ionos Hubbard- és a donor-akceptor modelleket egyesítettük egy közös effektív spinmodell levezetésével. A következő lépés az egyesített  $S = 1$  effektív spinmodell fázisdiagramjának meghatározása volt.

A fázishatárokat az energiagepek (spin-, töltés- és töltésátviteli gepek), a rácpont-entrópiák (egyrácpont- és kétrácpont-entrópia), valamint az ionicitás és a dimerizáció mint rendparaméter csatolásiállandó-függésének vizsgálata mutatta meg. A semleges és ionos fázisokat elválasztó fázishatárt már a gepekből is meg tudtuk határozni, de a semleges, ionos és dimerizált fázisokat elválasztó trikritikus pontot és a semleges és ionos fázisok közé ékelődő dimerizált tartományt csak a rácpont-entrópiák és a kétrácpont-entrópia dimerizációjának vizsgálata mutatta meg.

Az így kiegészített fázisdiagram már megmagyarázza az ionos Hubbard- és a donor-akceptor modellek között fennálló látszólagos ellentmondást is, így eredményeink teljes összhangba kerültek a korábbi vizsgálatok eredményeivel.

Az ionos Hubbard- és a donor-akceptor modellek vizsgálatából az alábbi tézispontba foglaltak tekinthetők saját eredménynek:

3. A DMRG algoritmussal az ionos Hubbard és a donor-akceptor modellek egyesített effektív  $S = 1$  spinmodelljének csatolási állandóinak függvényében kiszámítottam a spin-, töltés- és töltésátviteli gepek értékeit, majd az energiagepeket vizsgálva meghatároztam a semleges és ionos fázisokat elválasztó fázishatárt.

Munkám utolsó lépésként megvizsgáltam az elektron-fonon kölcsönhatás semleges-ionos átalakulásban játszott szerepét. Kiterjesztettem a semleges-ionos átalakulás egyesített effektív  $S = 1$  spinmodelljét az elektron-fonon csatolás adiabatikus figyelembevételével, az átfedési integrált és a Coulomb-vonzást modulálva. Vizsgálataimat ezen a modellen végeztem. Elsősorban arra voltam kíváncsi, hogy a rács lágyulása milyen hatással van a semleges-ionos átalakulás fázisdiagramjának szerkezetére, ezért az alapállapot energiája moduláció függését vizsgáltam és a következő eredményre jutottam:

4. Megmutattam, hogy az elektron-fonon kölcsönhatás, amennyiben csak az átfedési integrálban vesszük figyelembe ( $\alpha = 0$ ), nem változtatja meg a fázisátmenetek rendjét, továbbra is három fázist azonosíthatunk: a reguláris semleges, a dimerizált ionos és a reguláris ionos fázisokat, a fázisdiagram struktúrája is változatlan marad, pusztán a fázishatárok mozdulnak el a lánc lágyulásával, viszont a dimerizált tartomány jelentősen kiszélesedik. Ez magyarázhatja a semleges-ionos átalakulással együtt a reguláris-dimerizált átmenet megjelenését. Továbbá megmutattam, hogy ezek az eredmények  $\alpha \neq 0$  esetén, azaz az átfedési integrál és a Coulomb-vonzás egyidejű, eltérő mértékű ( $\alpha = 1/2$ ) modulálásakor is fennállnak.

# Irodalomjegyzék

- [Öss] Összefoglaló irodalom szilárdtestfizikából: Sólyom Jenő, A modern szilárdtestfizika alapjai I–III., ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2003; J. M. Ziman, Principles of the Theory of Solids, Cambridge at the University Press, Cambridge, 1972; C. Kittel, Bevezetés a szilárdtestfizikába, Műszaki Kiadó, Budapest, 1981
- [Le, 1998] Legeza Örs, Egyetemi doktori értekezés, 1998.
- [Wh, 1992] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [Wh, 1996] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **77**, 3633 (1996).
- [Le, 2003] Ö. Legeza, J. Röder, and B. A. Hess, Phys. Rev. B **67**, 125114 (2003).
- [Le, 2004] Ö. Legeza and J. Sólyom, Phys. Rev. B **70**, 205118 (2004).
- [Pe, 1998] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, K. Hallberg, *Density-Matrix Renormalization* (Lectures of a Seminar and Workshop), Dresden, 1998.
- [Le, 1996] Ö. Legeza and G. Fáth, Phys. Rev. B **53**, 14349 (1996).
- [Kh, 1973] A. S. Kholevo, Probl. Inf. Transm. **177**, 9 (1973).
- [Num] Numerical Recipes: The art of scientific computing, [www.nr.com](http://www.nr.com)
- [Ja, 2002] Jane K. Cullum, Ralph A. Wuilloughby, Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [Da, 1975] E. R. Davidson, J. Comput. Phys. **17**, 87 (1975).
- [Fi, 1971] M. E. Fisher, M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972);  
M. E. Fisher in *Critical Phenomena, Proc. 51st Enrico Fermi Summer School, Varena*, ed. M. S. Green, (Academic, NY, 1971)
- [Re, 1998] L. E. Reichl, A modern Course in Statistical Physics (John Wiley & Sons, New York, 1998).
- [Le, 2006] Ö. Legeza, F. Gebhard, and J. Rissler, Phys. Rev. B **74**, 195112 (2006).

- [Os, 2002] T. J. Osborne and M. A. Nielsen, Phys. Rev. A **66**, 032110 (2002).
- [Am, 2002] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, and R. Fazio, Nature (London) **416** 608 (2002).
- [Sy, 2003] O. F. Syljuasen, Phys. Rev. A **68** 60301(R) (2003).
- [Gu, 2003] S.-J. Gu, H.-Q. Lin, and Y.-Q. Li, Phys. Rev. A **68**, 042330 (2003).
- [Vi, 2004] J. Vidal, G. Palacios, and R. Mosseri, Phys. Rev. A **69**, 022107 (2004).
- [Ro, 2004] T. Roscilde, P. Verrucchi, A. Fubini, S. Haas, and V. Tognetti, Phys. Rev. Lett. **93**, 167203 (2004).
- [Ya, 2005] M.-F. F. Yang, Phys. Rev. A **71**, 030302(R) (2005).
- [Sz, 2007] E. Szirmai, Ö. Legeza, J. Sólyom condmat/0708.3799 (2007).
- [Ha, 1983] F. D. M. Haldane, Phys. Lett. **93A**, 464 (1983); Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [La, 1974] C. K. Lai, J. Math. Phys. **15**, 1675 (1974).
- [Su, 1975] B. Sutherland, Phys. Rev. B **12**, 3795 (1975).
- [Ta, 1982] L. A. Takhtajan, Phys. Lett. **87A**, 479 (1982).
- [Ba, 1983] H. M. Babujian, Phys. Lett. **90A**, 479 (1982); Nucl. Phys. B **215**, 317 (1983).
- [Fá, 1991] G. Fáth and J. Sólyom, Phys. Rev. B **44**, 11836 (1991).
- [It, 1997] C. Itoi and M.-H. Kato, Phys. Rev. B **55**, 8295 (1997).
- [Af, 1987] I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb, and H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [Pa, 1987] J. B. Parkinson, J. Phys. C: Solid State Phys. **20**, L1029 (1987).
- [Ba, 1989] M. N. Barber and M. T. Batchelor, Phys. Rev. B **40**, 4621 (1989).
- [Kl, 1989] A. Klümper, Europhys. Lett. **9**, 815 (1989).
- [Xi, 1993] Y. Xian, Phys. Lett. **183A**, 437 (1993).
- [Ch, 1990] A. V. Chubukov, Phys. Rev. B **43**, 3337 (1991), J. Phys.: Condens. Matter **2**, 1593 (1990).
- [Iv, 2003] B. A. Ivanov and A. Kolezhuk, Phys. Rev. B **68**, 052401 (2003).
- [Fá, 1995] G. Fáth and J. Sólyom, Phys. Rev. B **51**, 3620 (1995).

- 
- [Le, 1997] Ö. Legeza, G. Fáth, and J. Sólyom, Phys. Rev. B **55**, 291 (1997).
- [Ka, 2002] N. Kawashima, Prog. Theor. Phys. Suppl. **145**, 138 (2002).
- [Lä, 2003] A. Läuchli, G. Schmid, and T. Trebst, cond-mat/0311082 (2003).
- [Wh, 1996] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **77**, 3633 (1996).
- [Sr, 1993] E. S. Srensen and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **71**, 1633 (1993).
- [Bu, 2005] K. Buchta, G. Fáth, Ö. Legeza and J. Sólyom, Phys. Rev. B **72**, 054433 (2005).
- [Hu, 1965] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963); *ibid.* **277**, 237 (1964); *ibid.* **281**, 401 (1964); *ibid.* **285**, 542 (1965).
- [Ma, 1989] J. B. Marston and I. Affleck, Phys. Rev. B **39**, 11538 (1989).
- [As, 1999] R. Assaraf, P. Azaria, M. Caffarel, and P. Lecheminant, Phys. Rev. B **60**, 2299 (1999).
- [As, 2004] R. Assaraf, P. Azaria, E. Boulat, M. Caffarel, and P. Lecheminant, Phys. Rev. Lett. **93**, 016407 (2004).
- [Ho, 2004] C. Honerkamp and W. Hofstetter, Phys. Rev. Lett. **92**, 170403 (2004).
- [As, 2005] F. F. Assaad, Phys. Rev. B **71**, 075103 (2005).
- [Sz, 2005] E. Szirmai and J. Sólyom, Phys. Rev. B **71**, 205108 (2005).
- [Sz, 2006] E. Szirmai and J. Sólyom, Phys. Rev. B **74**, 155110 (2006).
- [Li, 1968] E. H. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [Za, 2002] P. Zanardi, Phys. Rev. A **65**, 042101 (2002).
- [Wu, 2004] L.-A. Wu, M. S. Sarandy, and D. A. Lidar, Phys. Rev. Lett. **93**, 250404 (2004).
- [Gu, 2004] S.-J. Gu, S.-S. Deng, Y.-Q. Li, and H.-Q. Lin, Phys. Rev. Lett. **93**, 086402 (2004).
- [Le, 2006] Ö. Legeza and J. Sólyom, Phys. Rev. Lett. **96**, 116401 (2006).
- [Gi, 1992] T. Giamarchi and A. J. Millis, Phys. Rev. B **46**, 9325 (1992).
- [Boz] Összefoglaló irodalom a bozonizációról: J. Sólyom, Adv. Phys. **28**, 201 (1979); and A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, A. M. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).
- [Le, 2007] Ö. Legeza, J. Sólyom, L. Tincani, and R. M. Noack, Phys. Rev. Lett. **99**, 087203 (2007).

- [Ho, 1994] C. Holzhey, F. Larsen, and F. Wilczek, Nucl. Phys. **B424**, 443 (1994).
- [Ca, 2004] P. Calabrese and J. Cardy, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. P06002 (2004).
- [Af, 1991] I. Affleck and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. Lett. **67**, 161 (1991).
- [La, 2006] N. Laflorencie, E. S. Srensen, M.-S. Chang, and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **96**, 100603 (2006).
- [La, 2005] D. Larsson and H. Johannesson, Phys. Rev. Lett. **95**, 196406 (2005).
- [Fr] V. V. Franca and K. Capelle, cond-mat/0605207.
- [Bu, 2007] K. Buchta, Ö. Legeza, E. Szirmai, and J. Sólyom, Phys. Rev. B **75**, 155108 (2007).
- [Va, 1981] J. B. Torrance, J. E. Vazquez, J. J. Mayerle, and V. Y. Lee, Phys. Rev. Lett. **46**, 253 (1981).
- [To, 1981] J. B. Torrance, A. Girlando, J. J. Mayerle, J. C. Crowley, V. Y. Lee, P. Batail, and S. J. LaPlaca, Phys. Rev. Lett. **47**, 1747 (1981).
- [Hu, 1981] J. Hubbard and J. B. Torrance, Phys. Rev. Lett. **47**, 1750 (1981).
- [Fa, 2000] M. Fabrizio, A. O. Gogolin, and A. A. Nersesyan, Phys. Rev. Lett. **83**, 2014 (1999); Nucl. Phys. B **580**, 647 (2000).
- [To, 2001] M. E. Torio, A. A. Aligia, and H. C. Ceccatto, Phys. Rev. B **64**, 121105(R) (2001).
- [Zh, 2003] Y. Z. Zhang, C. Q. Wu, and H. Q. Lin, Phys. Rev. B **67**, 205109 (2003).
- [Ka, 2003] A. P. Kampf, M. Sekania, G. I. Japaridze, and P. Brune, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 5895 (2003).
- [Ma, 2004] S. R. Manmana, V. Meden, R. M. Noack, and K. Schönhammer, Phys. Rev. B **70**, 155115 (2004).
- [So, 2004] Z. G. Soos, S. A. Bewick, A. Peri, and A. Painelli, J. Chem. Phys. **120**, 6712 (2004).
- [Al, 2004] A. A. Aligia and C. D. Batista, cond-mat/0412026 (2004).
- [Tin] L. Tincani, R. Noack, and D. Baeriswyl (unpublished).
- [Br, 1983] R. Bruinsmaa, P. Bak, and J. B. Torrance, Phys. Rev. B **27**, 456 (1983).
- [Av, 1986] M. Avignon, C. A. Balseiro, C. R. Proetto, and B. Alascio, Phys. Rev. B **33**, 205 (1986).

- 
- [Gi, 1988] A. Girlando and A. Painelli, Phys. Rev. B **34**, 2131 (1986); A. Painelli and A. Girlando, *ibid.* **37**, 5748 (1988).
- [Ho, 1987] B. Horovitz and J. Sólyom, Phys. Rev. B **35**, 7081 (1987).
- [So, 1978] Z. G. Soos and S. Mazumdar, Phys. Rev. B **18**, 1991 (1978).
- [Vi, 2004] J. Vidal, G. Palacios, and R. Mosseri, Phys. Rev. A **69**, 022107 (2004); J. Vidal, R. Mosseri, and J. Dukelsky, *ibid.* **69**, 054101 (2004).
- [Le, 2006] Ö. Legeza, K. Buchta, and J. Sólyom, Phys. Rev. B **73**, 165124 (2006).
- [Ho, 1983] B. Horovitz and B. Schaub, Phys. Rev. Lett. **50**, 1942 (1983).
- [Gi, 1983] A. Girlando, F. Marzola, C. Pecile, and J. B. Torrance, J. Chem. Phys. **79**, 1075 (1983).
- [Ho, 1986] B. Horovitz, R. Shuker, and L. Zeiri, Phys. Rev. B **34**, 6056 (1986).
- [Gi, 1982] A. Girlando, R. Bozio, C. Pecile, and J. B. Torrance, Phys. Rev. B **26** 2306 (1982).
- [Av, 1986] M. Avignon, C. A. Balseiro, C. R. Proetto and B. Alascio, Phys. Rev. B **33**, 205 (1986).
- [Gi, 1986] A. Girlando and A. Painelli, Phys. Rev. B **34**, 2131 (1986).
- [To, 1987] J. B. Torrance, in *Low Dimensional Conductors and Superconductors*, (Plenum, New York, 1987) p. 113.
- [To, 1989] Y. Tokura, S. Koshihara, Y. Iwasa, H. Okamoto, T. Komatsu, T. Koda, N. Iwasawa, and G. Saito, Phys. Rev. Lett. **63**, 2405 (1989).
- [Ao, 1997] S. Aoki and T. Nakayama, Phys. Rev. B **56**, 2893 (1997).
- [Br, 1992] A. Brillante and A. Girlando, Phys. Rev. B **45**, 7026 (1992).
- [Gi, 1993] A. Girlando, A. Painelli, C. Pecile, G.-L. Calestani, C. Rizzoli, and R. M. Metzger, J. Chem. Phys. **98**, 7692 (1993).
- [Gi, 1985] A. Girlando, A. Painelli, and C. Pecile, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **120**, 17 (1985).
- [Sc, 1983] B. Horovitz and B. Schaub, Phys. Rev. Lett. **50**, 1942 (1983).
- [So, 1985] Z. G. Soos and S. Kuwajima, Chem. Phys. Lett. **122**, 315 (1985).
- [Na, 1986] N. Nagaosa, Solid State Commun. **57**, 179 (1986).
- [Ta, 1986] N. Nagaosa and J. Takimoto, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 2737 (1986); **55**, 2747 (1986); N. Nagaosa, *ibid.* **55** 2756 (1986).

[Cr, 1979] M. C. Cross and D. S. Fisher, Phys. Rev. B **19**, 402 (1979).